

This Page Is Inserted by IFW Operations  
and is not a part of the Official Record

## **BEST AVAILABLE IMAGES**

Defective images within this document are accurate representations of the original documents submitted by the applicant.

Defects in the images may include (but are not limited to):

- BLACK BORDERS
- TEXT CUT OFF AT TOP, BOTTOM OR SIDES
- FADED TEXT
- ILLEGIBLE TEXT
- SKEWED/SLANTED IMAGES
- COLORED PHOTOS
- BLACK OR VERY BLACK AND WHITE DARK PHOTOS
- GRAY SCALE DOCUMENTS

**IMAGES ARE BEST AVAILABLE COPY.**

**As rescanning documents *will not* correct images,  
please do not report the images to the  
Image Problem Mailbox.**

IN THE UNITED STATES PATENT AND TRADEMARK OFFICE

In re Application of:

SOO- JIN PARK *et al.*

Serial No.: *to be assigned*

Examiner: *to be assigned*

Filed: 12 December 2003

Art Unit: *to be assigned*

For: RED LUMINESCENT COMPOUND AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENT  
DEVICE USING THE SAME

**CLAIM OF PRIORITY UNDER 35 U.S.C. §119**

**Mail Stop : Patent Application**

Commissioner for Patents

P.O. Box 1450

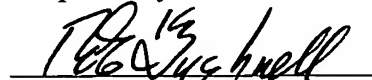
Alexandria, VA 22313-1450

Sir:

The benefit of the filing date of the following prior foreign applications, Korean Patent application No. 2002-85904 filed in Korea on 28 December 2002, and filed in the U.S. Patent and Trademark Office on 12 December 2003 is hereby requested and the right of priority provided in 35 U.S.C. §119 is hereby claimed.

In support of this claim, filed herewith is certified copies of said original foreign applications.

Respectfully submitted,



Robert E. Bushnell

Reg. No.: 27,774

Attorney for the Applicant

1522 "K" Street, N.W., Suite 300  
Washington, D.C. 20005  
(202) 408-9040  
Folio: P56916  
Date: 12/12/03  
I.D.: REB/rfc



별첨 사본은 아래 출원의 원본과 동일함을 증명함.

This is to certify that the following application annexed hereto  
is a true copy from the records of the Korean Intellectual  
Property Office.

출 원 번 호 : 10-2002-0085904  
Application Number

출 원 년 월 일 : 2002년 12월 28일  
Date of Application DEC 28, 2002

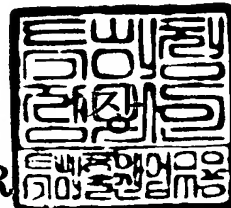
출 원 인 : 삼성에스디아이 주식회사  
Applicant(s) SAMSUNG SDI CO., LTD.



2003 년 03 월 08 일

특 허 청

COMMISSIONER



## 【서지사항】

【서류명】	특허출원서
【권리구분】	특허
【수신처】	특허청장
【참조번호】	0013
【제출일자】	2002.12.28
【국제특허분류】	H01L
【발명의 명칭】	적색 발광 화합물 및 이를 채용한 유기 전계 발광 소자
【발명의 영문명칭】	Red emitting compound and organic electroluminescence device
【출원인】	
【명칭】	삼성에스디아이 주식회사
【출원인코드】	1-1998-001805-8
【대리인】	
【성명】	이영필
【대리인코드】	9-1998-000334-6
【포괄위임등록번호】	1999-050326-4
【대리인】	
【성명】	이해영
【대리인코드】	9-1999-000227-4
【포괄위임등록번호】	2000-004535-8
【발명자】	
【성명의 국문표기】	박수진
【성명의 영문표기】	PARK, Soo Jin
【주민등록번호】	711023-2009510
【우편번호】	130-752
【주소】	서울특별시 동대문구 답십리1동 대우아파트 103동 502호
【국적】	KR
【발명자】	
【성명의 국문표기】	이관희
【성명의 영문표기】	LEE, Kwan Hee
【주민등록번호】	681212-1379723

【우편번호】	151-050
【주소】	서울특별시 관악구 봉천동 1630-5
【국적】	KR
【발명자】	
【성명의 국문표기】	김재일
【성명의 영문표기】	KIM, Jae Il
【주민등록번호】	741203-1255410
【우편번호】	151-010
【주소】	서울특별시 관악구 신림동 산 56-1 서울대학교 화학부
【국적】	KR
【발명자】	
【성명의 국문표기】	이진규
【성명의 영문표기】	LEE, Jin Kyu
【주민등록번호】	630107-1030821
【우편번호】	151-050
【주소】	서울특별시 관악구 봉천동 관악드림타운 112동 101호
【국적】	KR
【발명자】	
【성명의 국문표기】	권장혁
【성명의 영문표기】	KWON, Jang Hyuk
【주민등록번호】	670220-1787551
【우편번호】	440-150
【주소】	경기도 수원시 장안구 화서동 650 화서주공아파트 411동 1805호
【국적】	KR
【심사청구】	청구
【취지】	특허법 제42조의 규정에 의한 출원, 특허법 제60조의 규정에 의한 출원심사를 청구합니다. 대리인 이영필 (인) 대리인 이해영 (인)
【수수료】	
【기본출원료】	20 면 29,000 원
【가산출원료】	32 면 32,000 원

1020020085904

출력 일자: 2003/3/10

【우선권주장료】	0	건	0	원
【심사청구료】	14	항	557,000	원
【합계】	618,000			원
【첨부서류】	1.	요약서·명세서(도면)_1통		

**【요약서】****【요약】**

본 발명은 신규한 이리듐 금속 화합물을 이용한 인광 재료와, 이를 채용한 유기 전계 발광 소자를 제공한다. 본 발명의 인광 재료가 유기 전계 발광 소자의 발광층 재료로 사용되는 경우, 통상적인 적색 발광 재료를 사용한 경우와 비교하여 발광 효율이 향상되면서 구동 전압 특성이 개선되므로 유기 전계 발광 소자의 소비 전력이 감소되는 잇점이 있다.

**【대표도】**

도 1

## 【명세서】

## 【발명의 명칭】

적색 발광 화합물 및 이를 채용한 유기 전계 발광 소자{Red emitting compound and organic electroluminescence device}

## 【도면의 간단한 설명】

도 1은 일반적인 유기 전계 발광 소자의 구조를 보여 주는 단면도이고,

도 2는 본 발명의 화학식 2로 표시되는 화합물의 NMR(Nuclear Magnetic Resonance) 스펙트럼이고,

도 3은 본 발명의 화학식 3으로 표시되는 화합물의 NMR 스펙트럼이고,

도 4는 본 발명의 화학식 4로 표시되는 화합물의 NMR 스펙트럼이고,

도 5는 본 발명의 화학식 5로 표시되는 화합물의 NMR 스펙트럼이고,

도 6은 본 발명의 화학식 6로 표시되는 화합물의 NMR 스펙트럼이고,

도 7은 본 발명의 화학식 7로 표시되는 화합물의 NMR 스펙트럼이고,

도 8은 본 발명의 화학식 2-4로 표시되는 화합물의 PL(photoluminescence) 스펙트럼들이고,

도 9는 본 발명의 실시예 1에 따라 제조된 유기 전계 발광 소자에 있어서, 전압에 따른 휘도 변화를 나타내는 도면이고,

도 10은 본 발명의 실시예 1에 따라 제조된 유기 전계 발광 소자에 있어서, 전류 효율(Cd/A)과 전력 효율(lm/W)을 나타내는 도면이고,



도 11은 본 발명의 실시예 1에 따라 제조된 유기 전계 발광 소자에 있어서, EL(electroluminescence) 스펙트럼을 나타낸 도면이고,

도 12는 본 발명의 실시예 1에 따라 제조된 유기 전계 발광 소자에 있어서, 색좌표 특성을 나타내는 도면이고,

도 13은 본 발명의 화학식 2-7로 나타나는 화합물의 PL 최대치와 발광 양자효율을 나타낸 것이다.

#### <도면에 대한 간단한 설명>

- 11... 기판      12... 제1전극
- 13... 홀 주입층      14... 홀 수송층
- 15... 발광층      16... 홀 장벽층
- 17... 전자 수송층      18... 전자 주입층
- 19... 제2전극

#### 【발명의 상세한 설명】

#### 【발명의 목적】

#### 【발명이 속하는 기술분야 및 그 분야의 종래기술】

<20> 본 발명은 적색 발광 화합물 및 이를 채용한 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로서, 보다 상세하기로는 적색 발광 화합물과, 이를 채용하여 발광효율 및 구동 전압의 특성이 개선된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

<21> 전계 발광 소자(electroluminescent device)는 자발광형 표시소자로서, 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답 시간이 빠르다는 장점을 가지고 있다.

- <22> EL 소자는 발광층(emitting layer) 형성용 재료에 따라 무기 EL 소자와 유기 EL 소자로 구분된다. 여기에서 유기 EL 소자는 무기 EL소자에 비하여 휘도, 구동전압 및 응답 속도 특성이 우수하고 다색화가 가능하다는 장점을 가지고 있다.
- <23> 일반적인 유기 EL 소자는 기판 상부에 애노드가 형성되어있고, 이 애노드 상부에 홀 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 캐소드가 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가지고 있다. 여기에서 홀 수송층, 발광층 및 전자 수송층은 유기 화합물로 이루어진 유기 박막들이다.
- <24> 상술한 바와 같은 구조를 갖는 유기 EL 소자의 구동 원리는 다음과 같다.
- <25> 상기 애노드 및 캐소드 간에 전압을 인가하면 애노드로부터 주입된 홀은 홀 수송층을 경유하여 발광층에 이동된다. 한편, 전자는 캐소드로부터 전자 수송층을 경유하여 발광층에 주입되고 발광층 영역에서 캐리어들이 재결합하여 엑시톤(exiton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저상태로 변화되고, 이로 인하여 발광층의 분자가 발광함으로써 화상이 형성된다.
- <26> 상기 발광층 형성 재료는 그 발광 메카니즘에 따라 일중항 상태의 엑시톤을 이용하는 형광 재료와, 삼중항 상태의 엑시톤을 이용하는 인광 재료로 나뉜다.
- <27> 상기 인광 재료는 일반적으로 무거운 원자와 유기물 리간드를 함유하는 유기무기화합물의 구조를 가지고 있으며 무거운 원자에 의해 원래 금지 전이이던 삼중항 상태의 엑시톤이 허용 전이를 거쳐 인광 발광하게 된다. 인광 재료는 생성 확률이 75%인 삼중항 엑시톤을 사용할 수 있게 되어 생성 확률이 25%인 일중항 엑시톤을 이용하는 형광 재료의 경우와 비교하여 매우 높은 발광 효율을 가질 수 있다.

<28> 적색 발광 재료로는 DCJTB(4-(dicyanomethylene)-2-*t*-butyl-6-(1,1,7,7-tetramethyljulolidyl-9-enyl)-4H-pyran)등이 개발되었으나, 이들은 여전히 낮은 효율과 색순도 특성이 만족스럽지 못하다.

<29> 최근에는 루브렌(rubrene) 같은 제2의 도판트를 이용하는 방법이나 또는 이리듐 금속 화합물을 이용한 인광 재료들이 연구되고 있다(US 2002/0121638A1 및 US 2002/0034656 A1).

<30> 그러나 이들 화합물들도 발광 효율 및 박막 안정성이 충분치 않아 개선의 여지가 있어서 적색 발광 소자나 충전연색 발광 소자를 개발하기 위해서는 새로운 적색 발광 화합물의 개발이 시급한 해결과제이다.

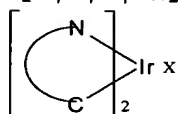
#### 【발명이 이루고자 하는 기술적 과제】

<31> 본 발명이 이루고자 하는 첫번째 및 두번째 기술적 과제는 상술한 문제점을 해결하여 발광 효율 특성이 개선된 적색 발광 화합물 및 그 제조방법과, 이를 채용한 화상 표시 장치를 제공하는 것이다.

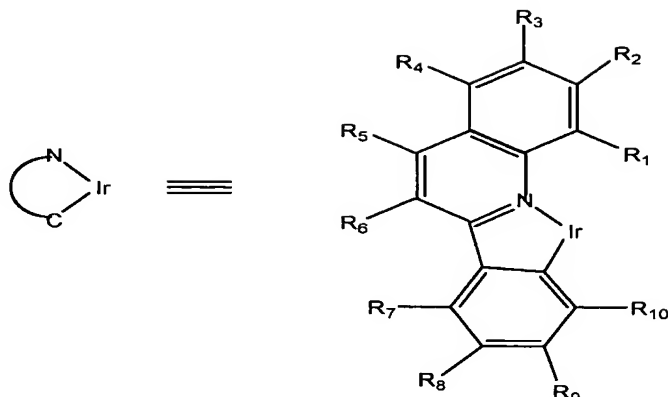
#### 【발명의 구성 및 작용】

<32> 상술한 첫번째 기술적 과제를 이루기 위하여 본 발명에서는, 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

<33> 【화학식 1】



&lt;34&gt;



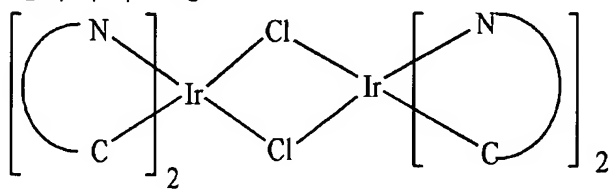
&lt;35&gt;

상기식중, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>3</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>8</sub>, R<sub>9</sub> 및 R<sub>10</sub>은 서로에 관계없이 치환 또는 비치환된 C1-C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 -C20의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C6-C30의 축합고리기, 치환 또는 비치환된 C6-30의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C2-30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C2-30의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-30의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C20의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C20의 헤테로사이클로알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되며, X는 두자리 리간드(bidentate ligand)이다.

&lt;36&gt;

본 발명의 두번째 기술적 과제는 화학식 11로 표시되는 화합물과, X 리간드 함유 화합물(XH)을 반응하는 단계를 포함하는 것을 특징으로 하는 화학식 1로 표시되는 화합물의 제조방법에 의하여 이루어진다.

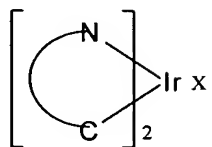
&lt;37&gt; 【화학식 11】



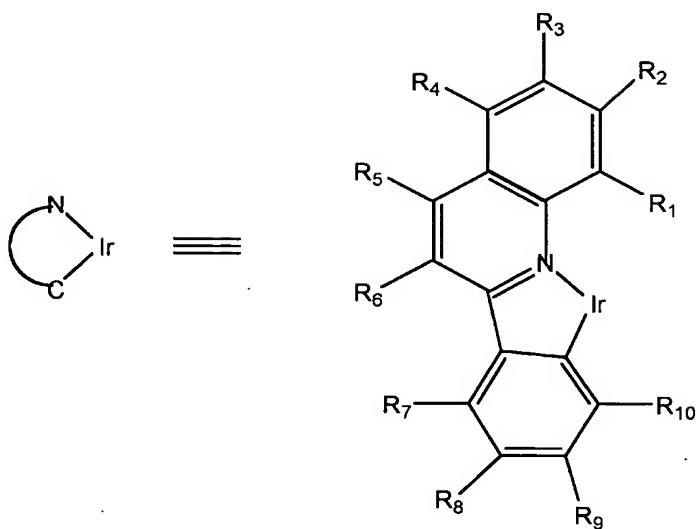
&lt;38&gt;

&lt;화학식 1&gt;

&lt;39&gt;



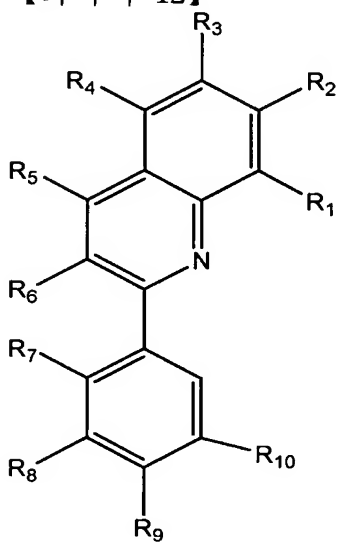
&lt;40&gt;



<41> 상기식중,  $R_1$ ,  $R_2$ ,  $R_3$ ,  $R_4$ ,  $R_5$ ,  $R_6$ ,  $R_7$ ,  $R_8$ ,  $R_9$ ,  $R_{10}$  및  $X$ 는 상술한 바와 같다.

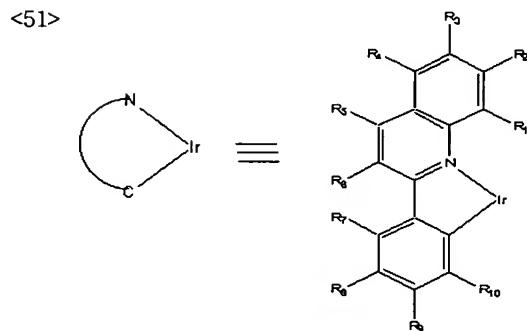
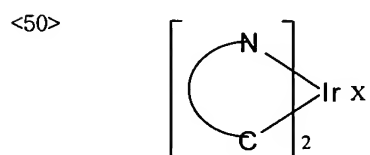
<42> 상기 화학식 11로 표시되는 화합물은, 화학식 12로 표시되는  $\omega$ -페닐퀴놀린 화합물과, 이리듐 클로라이드를 반응하여 제조된다.

<43> 【화학식 12】



- <44> 상기식중,  $R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9$  및  $R_{10}$ 은 상술한 바와 같다.
- <45> 본 발명의 세번째 기술적 과제는 상술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 화상 표시 장치에 의하여 이루어진다.
- <46> 상기 화상 표시 장치의 바람직한 태양으로서, 한 쌍의 전극 사이에 유기막을 구비하고 있는 유기 전계 발광 소자에 있어서, 상기 유기막이 상술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자가 제공된다.
- <47> 이하, 본 발명을 보다 상세하게 설명하기로 한다.
- <48> 본 발명은 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물을 제공한다.

<49> [화학식 1]

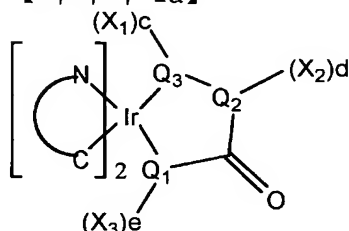


- <52> 상기식중,  $R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, R_6, R_7, R_8, R_9$  및  $R_{10}$ 은 서로에 관계없이 치환 또는 비치환된 C1-C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C20의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 축합 방향족 고리(fused aromatic ring)기,

치환 또는 비치환된 C6-30의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C2-30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C2-30의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-30의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C20의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C20의 헤테로사이클로알킬기이고, X는 두자리 리간드(bidentate ligand)이다.

<53> 상기 화학식 1의 화합물은 화학식 1a 또는 화학식 1b로 표시되는 것이 바람직하다.

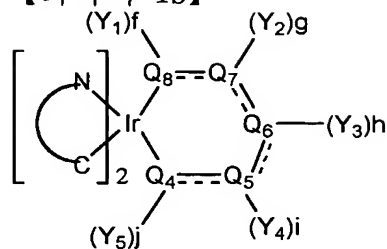
<54> 【화학식 1a】



<55> 상기식중, Q<sub>1</sub>, Q<sub>2</sub> 및 Q<sub>3</sub>는 서로에 관계없이 탄소(C), 산소(O), 질소(N) 또는 황(S)이고,

<56> X<sub>1</sub>, X<sub>2</sub>, X<sub>3</sub>은 서로에 관계없이 수소, 치환 또는 비치환된 C1-C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C20의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C6-C30의 축합고리기, 치환 또는 비치환된 C6-30의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C2-30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C2-30의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-30의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C20의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C20의 헤테로사이클로알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되고, c, d 및 e는 서로에 관계없이 0, 1 또는 2이고, 또는 상기 X<sub>1</sub>과 X<sub>2</sub>는 서로 연결되며,

## &lt;57&gt; 【화학식 1b】



<58> 상기식중, Q<sub>4</sub>, Q<sub>5</sub>, Q<sub>6</sub>, Q<sub>7</sub>, Q<sub>8</sub> 및 Q<sub>9</sub>은 서로에 관계없이 탄소(C), 산소(O), 질소(N) 또는 황(S)이고,

<59> Y<sub>1</sub>, Y<sub>2</sub>, Y<sub>3</sub>, Y<sub>4</sub>, Y<sub>5</sub>는 서로에 관계없이 단순히 화학결합을 나타내거나 수소, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>의 축합고리기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>20</sub>의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>의 헤테로사이클로알킬기이고, f, g, h, i 및 j는 서로에 관계없이 0, 1 또는 2이고, 또는 상기 Y<sub>1</sub>-Y<sub>5</sub>중 선택된 2개가 서로 연결된 형태를 갖는다

<60> 상기 화학식 1a에서, X<sub>1</sub>과 X<sub>2</sub>는 서로 연결된 형태를 가지는데, 이들은 5-6 원자환(five- or six-membered ring)을 형성하는 형태를 가지거나 또는 상기 5-6원자환들이 서로 융합된 고리 형태(fused ring)를 갖는다.

<61> 상기 화학식 1b에서, Y<sub>1</sub>-Y<sub>5</sub>중 선택된 2개가 서로 연결된다. 예를 들어, Y<sub>1</sub>과 Y<sub>2</sub>, Y<sub>2</sub>과 Y<sub>3</sub>, Y<sub>3</sub>과 Y<sub>4</sub>, 및/또는 Y<sub>4</sub>과 Y<sub>5</sub>는 서로 연결되어 5-6 원자환(five- or six-membered

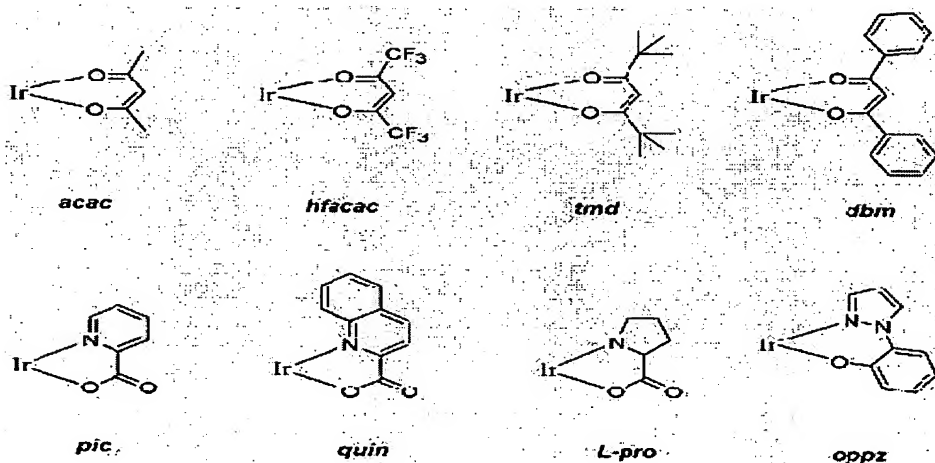


ring)을 형성하는 형태를 가지거나 상기 5-6원자환들이 서로 융합된 고리 형태(fused ring)를 갖는다.

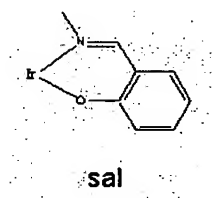
<62> 상기  $R_1 \sim R_{10}$ 은 서로에 관계없이 수소, 메틸, 에틸, 프로필, n-부틸, i-프로필, t-부틸, sec-부틸, t-암릴, 네오펜틸, 트리플루오로메틸, 펜타플루오로에틸, 펜타플루오로알킬, 헤테로아릴, 아릴, 벤질, 4-(tert-부틸)벤질, 3,5-디-(tert-부틸)벤질, 3,5-디(이소프로필)벤질, 나프틸, 페닐, 퓨릴(furyl), 티에닐(thienyl), 피리딜(pyridyl) 또는 헤테로 고리기이다.

<63> 상기 화학식 1에서, X의 구체적인 예로는 하기 구조식(편의상, Ir은 리간드와 함께 도시함)에 도시된 바와 같은 아세틸아세토네이트(acetylacetonate: acac), 헥사플루오로아세틸아세토네이트(hexafluoroacetylacetonate), 살리실리덴(salicylidene: sal), 피콜리네이트(picolinate: pic), 8-하이드록시퀴놀리네이트(hydroxyquinolinate),  $\alpha$ -amino acid L-프롤린(L-pro), 벤조일아세토네이트(benzoylacetonate: bza), 디벤질메탄(dibenzoylmethane: dbm), 테트라메틸헵탄디온(tetramethylheptanedione: tmd), 1-(2-하이드록시페닐)피라졸레이트(1-(2-hydroxyphenyl)pyrazolate: oppz)의 형태를 들 수 있다.

<64>

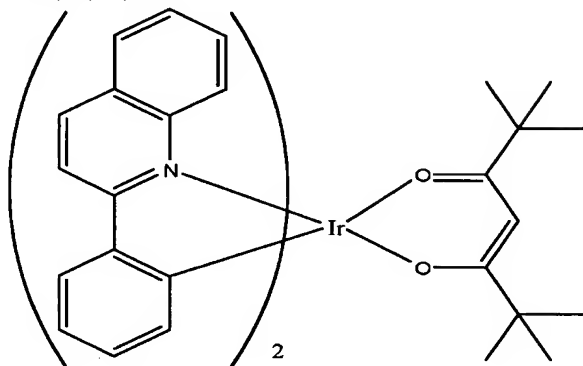


&lt;65&gt;

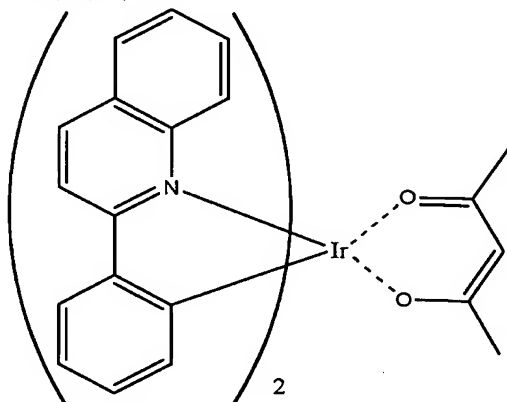


<66> 상기 화학식 1로 표시되는 적색 발광 화합물은 특히 화학식 2 내지 7로 표시되는 화합물인 것이 바람직하다.

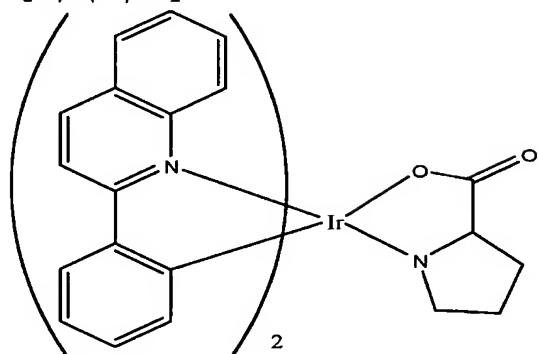
&lt;67&gt; 【화학식 2】



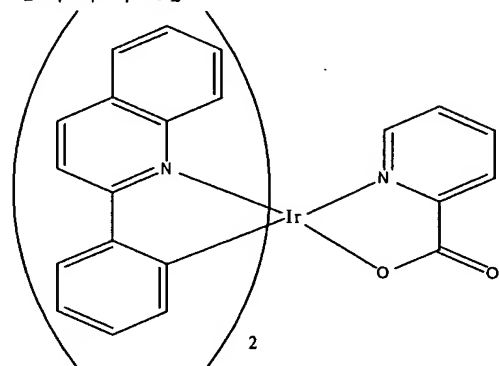
&lt;68&gt; 【화학식 3】



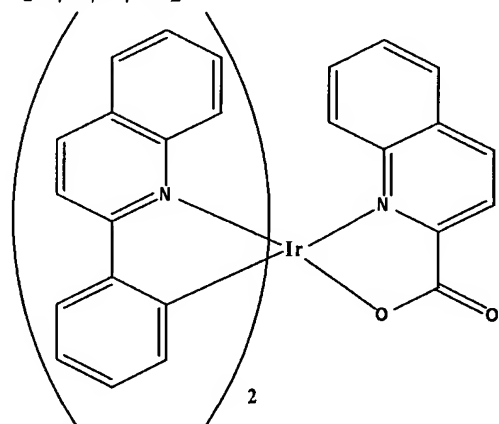
## &lt;69&gt; 【화학식 4】



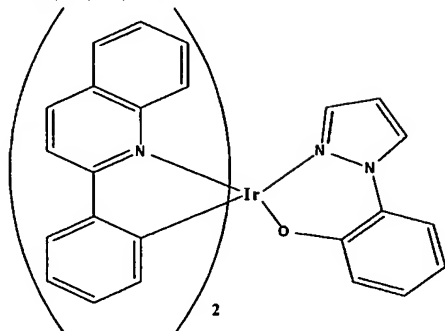
## &lt;70&gt; 【화학식 5】



## &lt;71&gt; 【화학식 6】



## &lt;72&gt; 【화학식 7】



<73> 본 발명에서 사용되는 치환기인 비치환된 C1-C20의 알킬기의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있고, 상기 알킬중 하나 이상의 수소 원자는 할로젠 원자, C1-C30의 알킬기, C1-C30의 알콕시기, 저급 알킬아미노기, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기, 술폰산기, 인산기 등의 치환기로 치환될 수 있다.

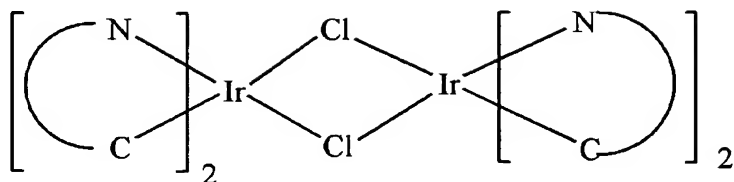
<74> 상기 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 비치환된 C1-C20의 알콕시기의 구체적인 예로는 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 이소부틸옥시, sec-부틸옥시, 펜틸옥시, iso-아밀옥시, 헥실옥시 등을 들 수 있고, 상기 알킬중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 C1-C20의 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.

<75> 상기 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 아릴기는 하나 이상의 고리를 포함하는 탄소수 6 내지 30개의 카보사이클 방향족 시스템을 의미하며, 상기 고리들은 펜던트 방법으로 함께 부착되거나 또는 융합(fused)될 수 있다. 아릴이라는 용어는 페닐; 나프틸, 테트라히드로나프틸, 푸린 인단과 같은 방향족 시스템을 포함한다. 또한 상기 아릴기중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 C1-C20의 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.

- <76> 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 아릴알킬기는 상기 정의된 바와 같은 아릴기에서 수소원자중 일부가 저급알킬, 예를 들어 메틸, 에틸, 프로필 등과 같은 그룹으로 치환된 것을 의미한다. 예를 들어 벤질, 페닐에틸 등이 있다. 상기 아릴알킬기중 하나 이상의 수소원자는 상술한 C1-C20의 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.
- <77> 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 헤테로아릴기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1, 2 또는 3개의 헤테로원자를 포함하고, 나머지 고리 원자가 C인 고리원자수 2 내지 30의 1가 모노사이클릭 고리 화합물 또는 상기 고리들은 펜던트 방법으로 함께 부착되거나 또는 융합(fused)될 수 있다.
- <78> 상기 헤테로아릴알킬기는 상기 헤테로아릴기의 수소 원자 일부가 저급 알킬기로 치환된 것을 의미하며, 헤테로아릴알킬기중 헤테로아릴에 대한 정의는 상술한 바와 같다. 상기 헤테로아릴알킬기중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 C1-C20의 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.
- <79> 상기 사이클로알킬기는 탄소원자수 4 내지 30의 1가 모노사이클릭을 의미한다. 상기 사이클로알킬기중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 C1-C20의 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.
- <80> 상기 헤테로사이클로알킬기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1, 2 또는 3개의 헤테로원자를 포함하고, 나머지 고리원자가 C인 고리원자수 1 내지 30의 1가 모노사이클릭을 의미하며, 상기 사이클로알킬기의 수소원자 일부가 저급 알킬기로 치환된 것을 의미한다. 상기 사이클로알킬기중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 C1-C20의 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.

- <81> 본 발명에서 사용하는 치환기인 축합 방향족 고리(fused aromatic ring)는 여러가지 고리 화합물에서 2개 또는 그 이상인 고리가 각각 원자 2개를 공유한 형태로써 하나가 되어 있을 때의 고리 화합물을 의미한다. 상기 고리기중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 C1-C20의 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.
- <82> 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 적색 발광 재료로서, 그의 특징적인 입체 구조로 인하여 에너지 전달이 우수하며 이로 인하여 높은 발광 효율을 나타낸다. 따라서 이 화합물은 여러가지 화상 표시 장치에 유용하게 적용가능하다. 특히, 유기 전계 발광 소자의 발광층 형성시 호스트 물질 또는 도펀트로서 가능하다.
- <83> 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 합성방법을 살펴보면 다음과 같다.
- <84> 화학식 1의 화합물은 화학식 11로 표시되는 화합물과, X 리간드 함유 화합물(XH)을 반응하여 제조된다. 상기 X 리간드 함유 화합물(XH)의 함량은 화학식 11로 표시되는 화합물 1몰을 기준으로 하여 2 내지 3 몰을 사용하며, 반응의 온도는 용매의 종류에 따라 가변적이지만, 70 내지 100℃ 범위이다.
- <85> 상기 반응에서 용매는 특별하게 제한되지는 않으나, 에탄올 등을 이용하며, 이의 함량은 화학식 11로 표시되는 화합물 100 중량부를 기준으로 하여 1500 내지 2000 중량부를 사용한다. 그리고 상기 반응시 염기를 사용하며, 염기의 구체적인 예로는  $K_2CO_3$ ,  $Cs_2CO_3$  등이 있다.
- <86> <화학식 11>

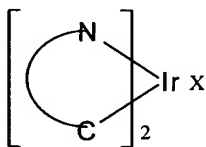
&lt;87&gt;



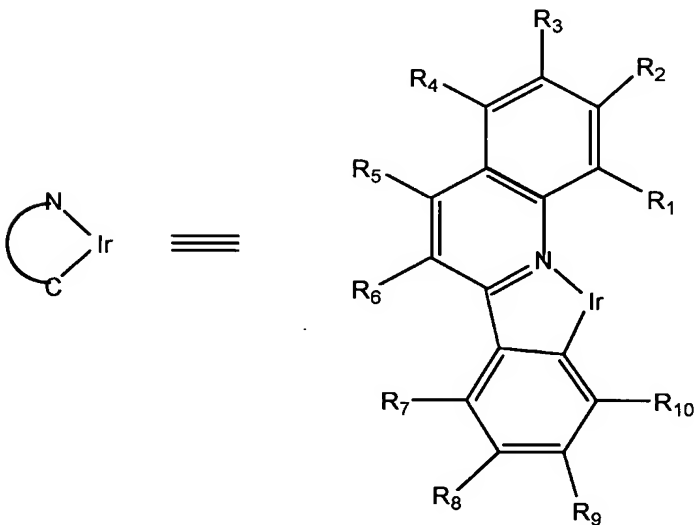
&lt;88&gt;

&lt;화학식 1&gt;

&lt;89&gt;



&lt;90&gt;



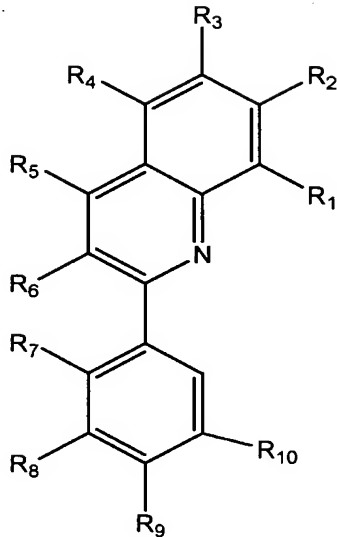
<91> 상기식중, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>3</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>8</sub>, R<sub>9</sub>, R<sub>10</sub> 및 X는 상술한 바와 같다.

<92> 상기 화학식 11로 표시되는 화합물은, 화학식 12로 표시되는  $\omega$ -페닐퀴놀린 화합물과, 이리듐 클로라이드(IrCl<sub>3</sub>)를 반응하여 합성된다. 이 반응에서 이리듐 클로라이드의 함량은  $\omega$ -페닐퀴놀린 화합물 1몰을 기준으로 하여 1/6 내지 1/2 몰을 사용하며, 반응의 온도는 70 내지 100℃ 범위이다.

<93> 상기 반응에서 용매로는 2-에톡시에탄올, 물, 글리세롤 등을 이용한다. 이 용매의 함량은 화학식 12로 표시되는 화합물 100 중량부에 대하여 2000 내지 3000 중량부이다.

<94> <화학식 12>

<95>



<96> 이하, 상술한 화학식 1의 화합물을 채용한 유기 전계 발광 소자 및 그 제조방법을 살펴보기로 한다.

<97> 화학식 1의 화합물은 유기 전계 발광 소자 형성시 발광층 형성 재료에 이용가능하며, 이를 이용한 바람직한 일실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(도 1 참조)의 제조방법을 설명하면 다음과 같다.

<98> 먼저, 기판(11)(미도시) 상부에 패터닝된 제1전극(12)을 형성한다. 여기에서 상기 기판(11)은 통상적인 유기 전계 발광 소자에서 사용되는 기판을 사용하는데, 투명성, 표면평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리기판 또는 투명 플라스틱 기판이 바람직하다. 그리고 상기 기판(11)의 두께는 0.3내지 0.7 mm인 것이 바람직하다.

<99> 상기 제1전극(12)의 형성 재료로는 홀 주입이 용이한 전도성 금속 또는 그 산화물로 이루어지며, 구체적인 예로서, ITO(Indium Tin Oxide), IZO(Indium Zinc Oxide), 니켈(Ni), 백금(Pt), 금(Au), 이리듐(Ir) 등을 사용한다.



<100> 상기 제1전극(12)이 형성된 기판(11)을 세정한 다음, UV/ 오존 처리를 실시한다.

이 때 세정방법으로는 이소프로판올(IPA), 아세톤 등의 유기용매를 이용한다.

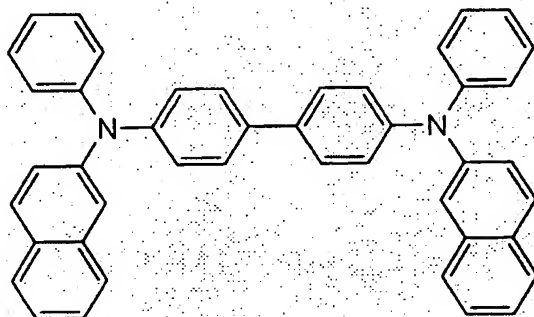
<101> 세정된 기판(11)의 제1전극(12) 상부에 홀 주입층(HIL)(13)을 선택적으로 형성한다. 이와 같이 홀 주입층(13)을 형성하면, 제1전극(12)과, 홀수송층(14)의 접촉저항을 감소시키는 동시에, 발광층에 대한 제1전극의 홀 수송능력이 향상되어 소자의 구동전압과 수명 특성이 전반적으로 개선되는 효과를 얻을 수 있다. 이러한 홀 주입층(13)의 형성재료는, 수용성 물질인 PEDOT{poly(3, 4-ethylenedioxythiophene)}/PSS(polystyrene parasulfonate), 스타버스트계 아민 물질(예: IDE 406(Idemitsu Kosan사))등과 같은 물질을 사용하며, 이러한 물질을 이용하여 제1전극(12) 상부에 스핀코팅한 다음, 이를 건조하여 홀 주입층(13)을 형성한다.

<102> HIL이 수용성 물질인 PEDOT인 경우에는 상기 건조 온도는 100 내지 250℃인 것이 바람직하며, 특히 약 200℃인 것이 보다 바람직하다. 그외에 진공증착가능한 물질인 경우에는 특별한 조치없이 다음층을 적층한다.

<103> 상기 홀 주입층(13) 상부에 홀 수송층(HTL)(14)을 형성한다.

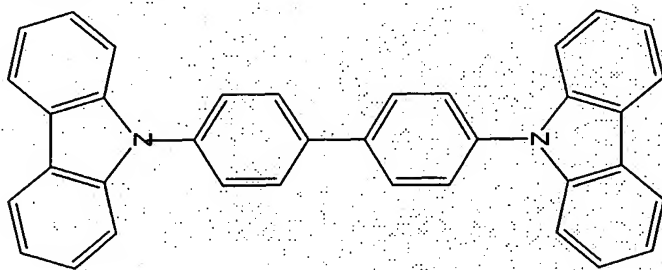
<104> 상기 홀 수송층(14) 형성 재료는 특별히 제한되지는 않으며, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), 화학식 8로 표시되는 N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐 벤지딘{N,N'-디(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenyl-benzidine: -NPB} 등이 사용되며, 홀 수송층 형성 방법은 특별하게 제한되지는 않으나, 스핀 코팅 또는 진공 증착법을 이용하며 저분자의 경우 진공증착을 이용한다.

## &lt;105&gt; 【화학식 8】



<106> 이어서, 상기 홀 수송층(14) 상부에 발광층(EML)(15)을 형성한다. 이 때 상기 발광층(15) 형성시, 화학식 1의 화합물을 단독으로 이용하거나, 이를 도펀트로 사용하여 통상적인 호스트 물질과 병용하는 것이 가능하다. 상기 호스트 물질로는 화학식 9으로 표시되는 CBP(4,4'-Bis(carbazol-9-yl)-biphenyl) 등을 이용한다.

## &lt;107&gt; 【화학식 9】



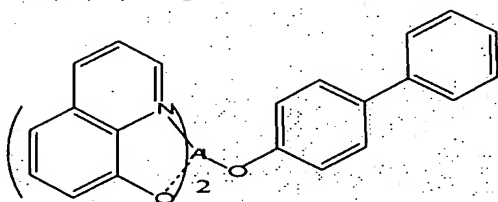
<108> 상기 발광층(15)의 형성 방법은 특별하게 제한되지는 않으나, 공증착 방법을 사용한다. 그리고 화학식 1의 화합물이 도펀트로 사용되는 경우, 그 함량이 특별하게 제한되는 것은 아니며, 발광층(15) 형성 재료 100 중량부를 기준으로 하여 5 내지 40 중량부인 것이 바람직하다. 만약 도펀트의 함량이 상기 범위를 벗어나면 EL 소자의 발광 특성이 저하되어 바람직하지 못하다.

<109> 상기 발광층(15)의 막 두께는 100 내지 500Å인 것이 바람직하다. 만약 발광층(15)의 두께가 100Å 미만인 경우에는 발광 효율이 저하되고, 500Å을 초과하는 경우에는 구동전압이 상승되어 바람직하지 못하다.

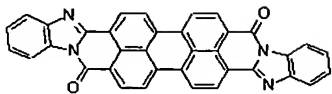
<110> 상기 발광층(15) 상부에 발광물질에서 형성되는 엑시톤이 전자수송층으로 이동되는 것을 막아주거나 홀이 전자수송층(17)으로 이동되는 것을 막아주는 역할을 하는 홀 억제층(HBL)(16)을 형성한다. 이 때 홀 억제층(16)의 형성 재료로는 페난트롤린(phenanthrolines)계 화합물(예: UDC사, BCP), 이미다졸계 화합물, 트리아졸(triazoles)계 화합물, 옥사디아졸(oxadiazoles)계 화합물(예: PBD), 알루미늄 착물(aluminum complex)(UDC사) 하기 구조식의 BALq) 등을 사용한다. 그리고 이의 형성 방법은 특별하게 제한되지 않고, 그 형성 재료에 따라 증착 또는 스핀코팅 방법을 이용한다.

<111> 상기 홀 억제층(16) 상부에 전자수송층(ETL)(17)을 형성한다. 상기 전자 수송층(17)의 형성 재료로는 화학식 10의 화합물, 옥사졸계 화합물, 이소옥사졸계 화합물, 트리아졸계 화합물, 이소티아졸(isothiazole)계 화합물, 옥사디아졸계 화합물, 티아다아졸(thiadiazole)계 화합물, 페릴렌(perylene)계 화합물, 알루미늄 착물(예: Alq3(트리스(8-퀴놀리놀라토)-알루미늄(tris(8-quinolinolato)-aluminium) BALq, SALq, Almq3, 갈륨 착물(예: Gaq'2OPiv, Gaq'2OAc, 2(Gaq'2))을 사용한다. 그리고 전자수송층(17)의 형성방법은 형성 재료에 따라 진공 증착 방법 또는 스핀 코팅 방법을 이용한다.

<112> 【화학식 10】



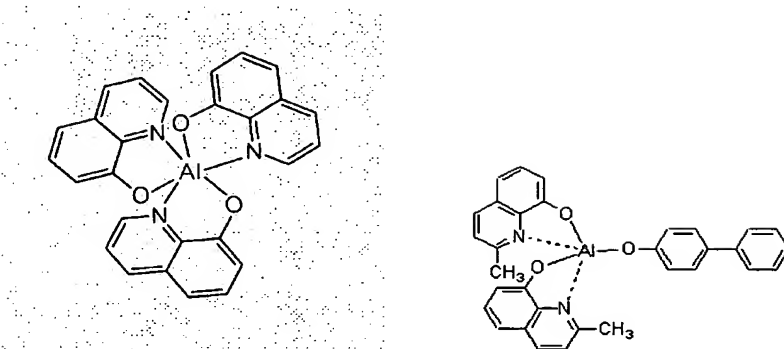
&lt;113&gt;



&lt;114&gt;

페릴렌계 화합물

&lt;115&gt;

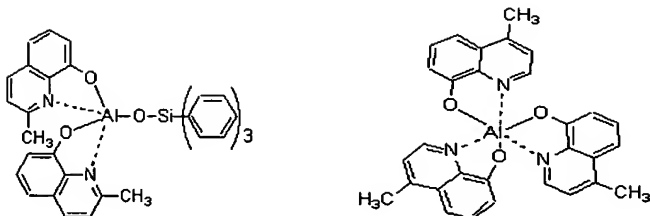


&lt;116&gt;

Alq3

BA1q

&lt;117&gt;

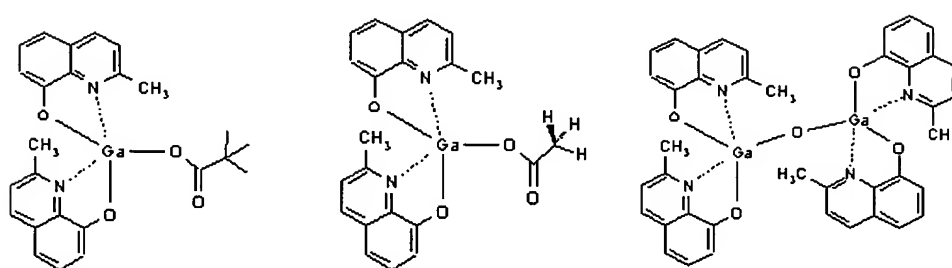


&lt;118&gt;

SA1q

Almq3

&lt;119&gt;



&lt;120&gt;

Gaq'2OPiv

Gaq'2OAc,

2(Gaq'2)

&lt;121&gt;

상기 전자 수송층(17) 상부에는 전자 주입층(EIL)(18)을 적층한다. 이의 형성 재료로는 상술한 구조식을 갖는 Alq3, LiF, NaCl, CsF 등을 이용하며, 이의 형성 방법은 형

성 재료에 따라 진공 증착 방법, 또는 스퍼 코팅 방법을 이용한다. 그리고 전자 주입층 (18)의 두께는 1 내지 15 Å 범위인 것이 바람직하다.

<122> 상기 전자 주입층(18) 상부에 제2전극(19)을 형성하고, 상기 결과물을 봉지하여 유기 EL 소자를 완성한다.

<123> 상기 제2전극(19)은 일 함수가 작은 금속 즉, Li, Ca, LiF/Ca, LiF/Al, Al, Mg, Mg 합금을 이용하여 이를 증착하여 형성한다. 상기 제2전극(19)의 두께는 800 내지 3000 Å 인 것이 바람직하다.

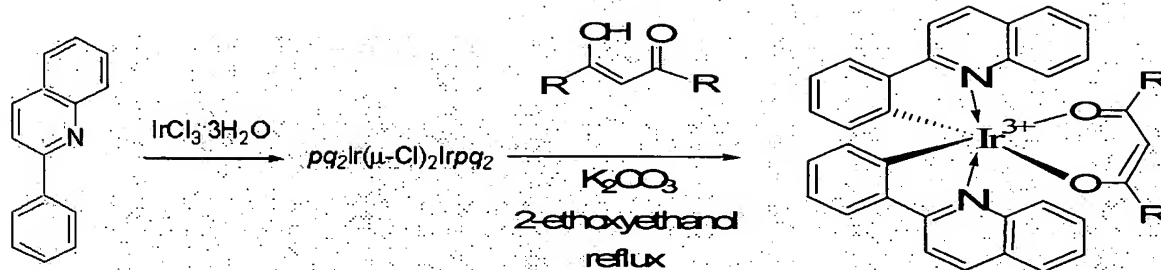
<124> 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 도 1에 나타난 바와 같은 적층 구조를 가질 수도 있고, 필요에 따라 한층 또는 2층의 중간층을 더 형성하는 것도 가능하다. 또한, 홀 억제층, 전자주입층 등은 선택적으로 형성가능한 층으로서, 경우에 따라서는 형성하지 않아도 무방하다.

<125> 이하 본 발명을 하기 실시예를 들어 설명하기로 한다. 다만, 본 발명이 하기 실시예들에 한정되는 것은 아니다.

<126> 하기 실시예들로부터 합성된 화합물들은  $^1\text{H}$ -NMR과  $^{13}\text{C}$ -NMR 그리고 UV와 스펙트로플루오로미터를 이용하여 그 구조를 확인하였고, H-NMR과  $^{13}\text{C}$ -NMR은 브루커(Bruker)AM-300 분광기를 사용하여 기록하였다. 그리고 UV 특성은 베크만(BECKMAN) DU-650를 사용하여 측정하였고,, 스펙트로플루오로미터로는 JASCO FP-750을 사용하였다.

<127> 하기 반응식 1은 합성에 1 및 2에 대한 것이다.

## &lt;128&gt; 【반응식 1】



<129> (A) (B) 화학식 2(R=tert부틸) 또는 화학식 3(R=CH<sub>3</sub>)

<130> 합성예 1: 화학식 2의 화합물의 제조

<131> 2-에톡시에탄올(22.5ml)과 물(7.5ml)을 혼합한 용액에 이리듐

클로라이드(IrCl<sub>3</sub>·3H<sub>2</sub>O, 1mmol)과 w-페닐퀴놀린(6mmol)을 넣고 48시간동안 환류하여 화합물 (B)를 얻었다.

<132> 에탄올(20ml)에 화합물 (B)(1mmol)과, 2,2,6,6-테트라메틸헵탄-3,5-디온 (2,2,6,6-Tetramethylheptane-3,5-dione) (tmd) 2.5 mmol, 그리고 2N의 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (10 ml)를 넣고 48시간 동안 환류시켰다. 생성된 고체를 여과한 다음, 이를 에탄올과 아세톤을 이용하여 세척하여 화학식 2의 화합물을 얻었다(수율: 85%).

<133> <sup>1</sup>H-NMR(CDCl<sub>3</sub>, 500MHz): (ppm) 8.48(d, 2H), 8.38(d, 2H), 8.26(d, 2H), 7.99(t, 4H), 7.53(t, 21H), 7.39(t, 21H) 6.89(t, 4H), 6.55(t, 2H), 6.37(d, 2H), 4.90(s, 1H), 0.56(s, 6H)

<134> 합성예 2: 화학식 3의 화합물의 제조

<135> 2-에톡시에탄올(22.5ml)과 물(7.5ml)을 혼합한 용액에 이리듐

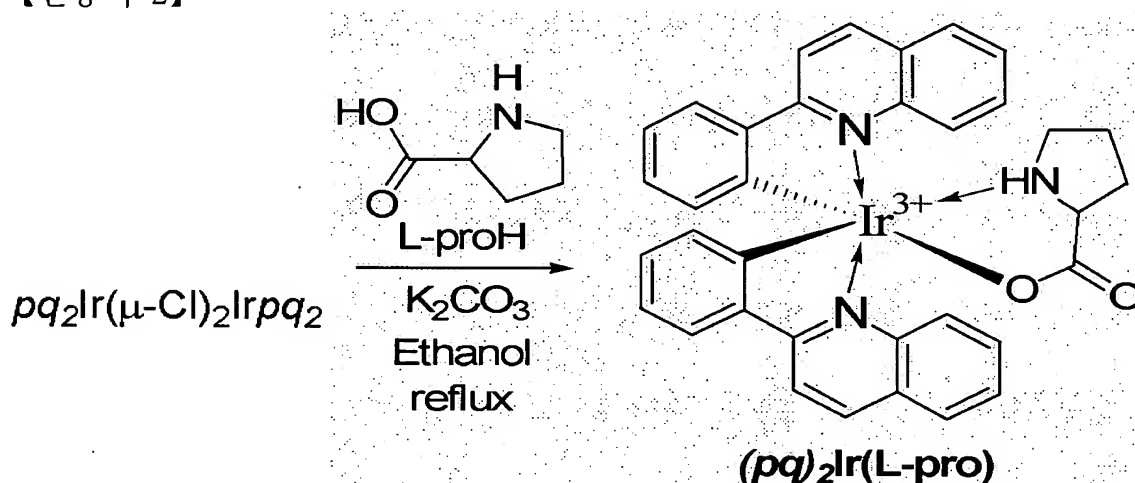
클로라이드(IrCl<sub>3</sub>·3H<sub>2</sub>O, 1mmol)과 w-페닐퀴놀린(6mmol) (A)을 부가하고 이를 48시간동안 환류하여 화합물 (B)를 얻었다.

<136> 에탄올(20ml)에 상기 화합물 (B)(1mmol)과, 아세틸아세톤(acacH) 2.5 mmol과 2N  $K_2CO_3$  용액 10 ml를 넣고 48시간동안 환류하였다. 그 결과, 흰색의 고체가 형성되었고 이 고체를 여과한 다음 이를 에탄올과 아세톤을 이용하여 세척하여 화학식 3의 화합물을 얻을 수 있다. 수율은 85% 였다.

<137>  $^1H$ -NMR( $CDCl_3$ , 500MHz): (ppm) 8.50(d, 2H), 8.38(d, 2H), 8.26(d, 2H), 8.02(d, 2H), 7.99(d, 2H), 7.55(m, 21H), 6.87(t, 4H), 6.54(t, 2H), 6.289(d, 2H), 4.70(s, 1H), 1.46(s, 6H)

<138> 하기 반응식 2는 합성예 3에 대한 것이다.

<139> 【반응식 2】



<140> (B) (화학식 4)

<141> 합성예 3: 화학식 4의 화합물의 제조

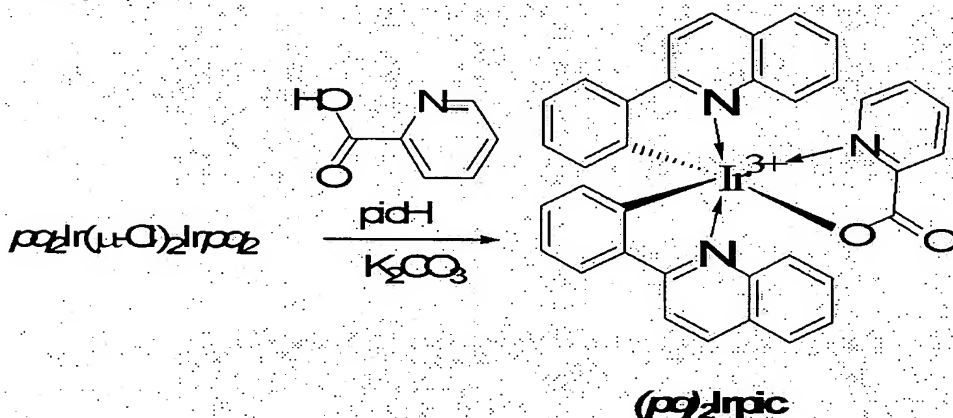
<142> 2-에톡시에탄올(22.5ml)과 물(7.5ml)를 혼합한 용액에 이리듐 클로라이드( $IrCl_3 \cdot 3H_2O$ , 1mmol)와 w-페닐퀴놀린(6mmol)을 넣고 48시간동안 환류하여 화합물 (B)를 얻었다.

<143> 에탄올(20ml)에 화합물 2(1mmol)와  $\alpha$ -아미노산 L-프로린(L-proH) 2.5 mmol 및 2N의  $K_2CO_3$  용액 (10 ml)을 부가하고 이를 48시간 환류시켰다. 생성된 고체를 여과한 다음, 이를 에탄올과 아세톤을 이용하여 세척하면 붉은색을 띠는 화학식 4의 화합물을 얻었다 (수율: 85%).

<144>  $^1H$ -NMR( $CDCl_3$ , 300MHz): (ppm) 8.70(m, 1H), 8.49(m, 3H), 8.35(d, 12H), 8.09(m, 3H), 7.64(m, 3H), 7.57(m, 1H), 7.39(t, 1H), 6.95(m, 1H), 6.86(m, 1H), 6.77(m, 1H), 6.66(m, 1H), 6.49(m, 1H), 5.93(d, 1H), 5.56(m, 1H), 2.50(m, 1H), 1.21(m, 5H)

<145> 하기 반응식 3은 합성예 4에 대한 것이다.

<146> 【반응식 3】



<147> (B) 화학식 5

<148> 합성예 4: 화학식 5의 화합물의 제조

<149> 2-에톡시에탄올(22.5ml)과 물(7.5ml)를 혼합한 용액에 이리듐

클로라이드( $IrCl_3 \cdot 3H_2O$ , 1mmol)와 w-페닐퀴놀린(6mmol)을 넣고 48시간동안 환류하여 화합물 (B)를 얻었다.

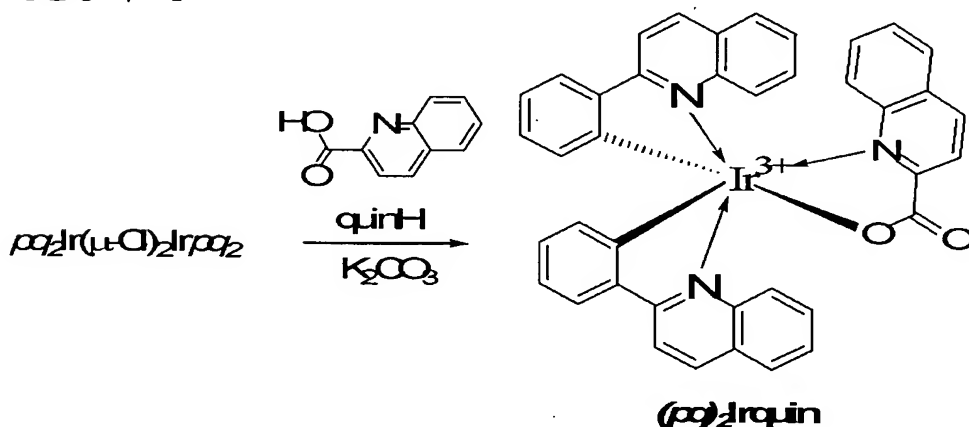


<150> 에탄올(20ml)에 화합물 2(1mmol)와 피콜리네이트 (picH) 2.5 mmol 및 2N의  $K_2CO_3$  용액 (10 ml)을 부가하고 이를 48시간 환류시켰다. 생성된 고체를 여과한 다음, 이를 에탄올과 아세톤을 이용하여 세척하여 세척하면 붉은색을 띠는 화학식 5의 화합물을 얻었다. 수율은 80% 였다.

<151>  $^1H$ -NMR( $CDCl_3$ , 500MHz): 8.64 (d, 1H, J 8.6 Hz), 8.57 (d, 1H, J 8.7 Hz), 8.48 (m, 3H), 8.22 (d, 1H, J 7.9 Hz), 8.06 (d, 1H, J 7.5 Hz), 8.00 (d, 1H, J 7.2 Hz), 7.94 (d, 1H, J 9.3 Hz), 7.85 (m, 2H), 7.60 (d, 1H, J 7.3 Hz), 7.56 (m, 1H), 7.50 (m, 2H), 7.41 (m, 1H), 7.22 (d, 1H, J 8.7 Hz), 7.05 (t, 1H, J 15.8 Hz), 6.96 (m, 2H), 6.73 (t, 1H, J 14.1 Hz), 6.64 (m, 2H), 6.11 (d, 1H, J 7.3 Hz).

<152> 하기 반응식 4는 합성에 5에 대한 것이다.

<153> 【반응식 4】



<154> (B) 화학식 6

<155> 합성에 5: 화학식 6의 화합물의 제조

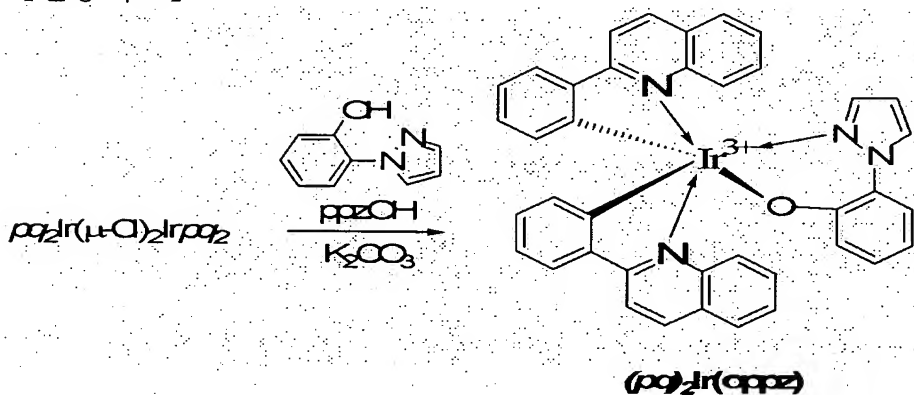
<156> 2-에톡시에탄올(22.5ml)과 물(7.5ml)를 혼합한 용액에 이리듐 클로라이드( $\text{IrCl}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ , 1mmol)와 w-페닐퀴놀린(6mmol)을 넣고 48시간동안 환류하여 화합물 (B)를 얻었다.

<157> 에탄올(20ml)에 화합물 2(1mmol)와 8-하이드록시퀴놀리네이트 (quinH) 2.5 mmol 및 2N의  $\text{K}_2\text{CO}_3$  용액 (10 ml)을 부가하고 이를 48시간 환류시켰다. 생성된 고체를 여과한 다음, 이를 에탄올과 아세톤을 이용하여 세척하여 세척하면 붉은색을 띠는 화학식 6의 화합물을 얻었다. 수율은 80% 였다.

<158>  $^1\text{H-NMR}(\text{CDCl}_3, 300\text{MHz})$ : 8.80 (d, 1H, J 9.7 Hz), 8.59 (d, 1H, J 8.8 Hz), 8.48 (d, 1H, J 8.8 Hz), 8.40 (d, 1H, J 8.5 Hz), 8.33 (m, 2H), 8.20 (d, 1H, J 7.8 Hz), 8.01 (m, 3H), 7.83 (m, 2H), 7.70 (d, 2H, J 8.9 Hz), 7.57 (d, 1H, J 15.8 Hz), 7.44 (m, 2H), 7.32 (m, 2H), 7.06 (t, 1H, J 25.7 Hz), 6.96 (t, 1H, J 15.0 Hz), 6.76 (t, 1H, 14.5 Hz), 6.65 (m, 3H), 6.00 (d, 1H, J 7.7 Hz).

<159> 하기 반응식 5는 합성에 6에 대한 것이다.

<160> 【반응식 5】



<161> (B) 화학식 7

<162> 합성에 6: 화학식 7의 화합물의 제조

- <163> 2-에톡시에탄올(22.5ml)과 물(7.5ml)를 혼합한 용액에 이리듐 클로라이드( $\text{IrCl}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ , 1mmol)와 w-페닐퀴놀린(6mmol)을 넣고 48시간동안 환류하여 화합물 (B)를 얻었다.
- <164> 에탄올(20ml)에 화합물 2(1mmol)와  $\alpha$ -아미노산 1-(2-하이드록시페닐)피라졸레이트 (ppzoH) 2.5 mmol 및 2N의  $\text{K}_2\text{CO}_3$  용액 (10 ml)을 부가하고 이를 48시간 환류시켰다. 생성된 고체를 여과한 다음, 이를 에탄올과 아세톤을 이용하여 세척하여 세척하면 붉은색을 띠는 화학식 7의 화합물을 얻었다. 수율은 80% 였다.
- <165> 상기 합성에 1-3에 따라 제조된 화학식 2-4의 화합물을 각각 methylene chloride에 용해하여 대응하는 용액을 준비한 다음, 이의 PL 스펙트럼을 살펴보고, 그 스펙트럼은 도 8에 나타나 있다.
- <166> 도 8을 참조하면 화합물 2는 화합물 3 대비 약 170%, 화합물 4는 약 140% 정도 높은 발광 세기를 보여주었고 발광 피크 값은 화합물 2가 595nm로 가장 적색에 가까운 값을 나타냄을 알 수 있었다.
- <167> 실시예 1
- <168> 애노드로는 코닝사의  $10 \ \Omega/\text{cm}^2$  ITO 기판을 사용하였고, 상기 기판 상부에 IDE406을 진공 증착하여 홀 주입층을 600Å 두께로 형성하였다. 이어서, 상기 홀 주입층 상부에 상기 화학식 5의 화합물을 300Å의 두께로 진공 증착하여 홀 수송층을 형성하였다. 상기 홀 수송층 상부에 화학식 2의 화합물 12 중량부와 화학식 6의 CBP 88 중량부를 스퍼터코팅하여 200Å 두께로 발광층을 형성하였다.

<169> 그 후 상기 발광층 상부에 상기 화학식 7의 화합물을 진공 증착하여 50Å 두께의 HBL층을 형성하였다. 그 후 상기 발광층 상부에 Alq3를 진공 증착하여 200Å 두께의 전자 주입층을 형성하였다. 이 전자 주입층 상부에 LiF 10Å과 Al 3000Å 을 순차적으로 진공 증착하여 LiF/Al 전극을 형성함으로써 유기 전계 발광 소자를 완성하였다.

<170> 실시예 2-3

<171> 발광층 형성시 화학식 2의 화합물 대신 화학식 3의 화합물과 화학식 4의 화합물을 각각 사용한 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법에 따라 실시하여 유기 전계 발광 소자를 완성하였다.

<172> 상기 실시예 1에 따라 제조된 유기 전계 발광 소자에 있어서, 휘도, 색좌표 및 효율 특성을 측정하여 하기 표 1에 나타내었다.

<173> **【표 1】**

전압(V)	A(mA/cm <sup>2</sup> )	휘도	전류효율	전력 효율	CIE(x, y)
3	0.1262	8.897	7.0480	7.3807	(0.62, 0.37)
3.5	1.0172	82.51	8.1114	7.2808	(0.62, 0.37)
4	3.1626	258.4	8.1704	6.4170	(0.62, 0.37)
4.5	6.9463	551.8	7.9439	5.5459	(0.62, 0.37)
5	13.1024	992.9	7.5780	4.7614	(0.62, 0.37)
5.5	22.4044	1603	7.1549	4.0868	(0.62, 0.37)
6	35.6763	2394	6.7103	3.51353	(0.62, 0.37)
6.5	53.7675	3374	6.2752	2.0319	(0.62, 0.37)
7	77.865	4583	5.8858	2.6415	(0.62, 0.37)

<174> 상기 표 1로부터, 높은 효율과 저전압에서 구동되는 점을 알 수 있고 색좌표 또한 적색 발광물질로서 훌륭함을 알 수 있었다.

<175> 상기 실시예 1의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 휘도-전압 특성 및 발광효율을 조사하여 도 9 및 도 10에 각각 나타내었다.

- <176> 도 9 및 도 10를 참조하면, 기존의 형광물질의 효율 (3~5cd/A)보다 매우 높은 효율을 보여주고 있으며 색좌표 또한 매우 좋음을 알 수 있었다.
- <177> 상기 실시예 1의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 전계 발광(EL) 스펙트럼 및 색좌표 특성을 조사하여 도 11 및 도 12에 나타나있다.
- <178> 도 11 및 도 12을 참조하면, 색좌표가 형광재료에서 보다는 훨씬 적색 파장으로 이동되어 나타남을 알 수 있다. 도 11의 스펙트럼 또한 600nm부근에서 최대피크가 나타나 적색을 효과적으로 나타냄을 알 수 있었다.
- <179> 한편, 화학식 2-7로 나타나는 화합물의 PL 최대치와 발광 양자효율을 도 13에 나타내었다.
- <180> 도 13을 참조하면, 화학식 2-7의 화합물들이 600nm에서 용액상 PL을 나타내며 최대 파장범위가 590nm~600nm사이에서 형성됨을 알 수 있다. 이는 유기 전계 발광에 응용될때 적색의 NTSC 파장에 가까워질 수 있음을 알 수 있었다.
- <181> 이와 같이 본 발명의 발광 화합물들은 기존의 형광 적색 발광 도판트가 가지는 효율(3~5cd/A)(C.H. Chen, C.W. Tang et al. *Macromol. Symp.* (1997) 125, 49-58)보다 향상된 효율 특성과 구동전압(5~6V)이 감소되는 효과를 나타내어 전력 소비 효율을 획기적으로 줄일수 있다. 또한 색좌표 또한 우수하여 형광재료보다도 우수한 색재현성을 나타낼수 있다.

#### 【발명의 효과】

- <182> 이상에서 살펴본 바와 같이, 본 발명의 화학식 1의 화합물은 적색 발광 재료로서, 이는 각종 화상 표시 장치에 적용가능하다. 특히 상기 화학식 1의 화합물을 유기 전계

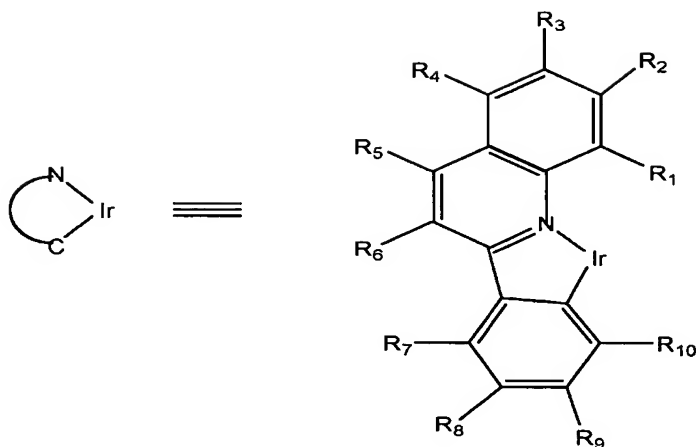
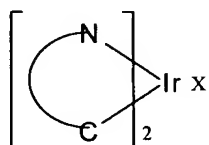
발광 소자의 발광층 재료로 사용하는 경우, 통상적인 적색 발광 재료를 사용한 경우와 비교하여 발광 효율이 향상되면서 구동 전압 특성이 개선되므로 유기 전계 발광 소자의 소비 전력이 감소되는 잇점이 있다.

## 【특허청구범위】

## 【청구항 1】

화학식 1로 표시되는 화합물:

< 화학식 1 >

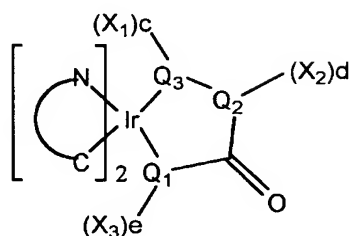


상기식중, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>3</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>8</sub>, R<sub>9</sub> 및 R<sub>10</sub>은 서로에 관계없이 치환 또는 비치환된 C1-C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C20의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C6-C30의 축합고리기, 치환 또는 비치환된 C6-30의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C2-30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C2-30의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-30의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C20의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C20의 헤테로사이클로알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되며, X는 두자리 리간드(bidentate ligand)이다.

## 【청구항 2】

제1항에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물이 화학식 1a 또는 1b로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물.

< 화학식 1a >



상기식중 , Q<sub>1</sub>, Q<sub>2</sub> 및 Q<sub>3</sub>는 서로에 관계없이 탄소(C), 산소(O), 질소(N) 또는 황(S)이고,

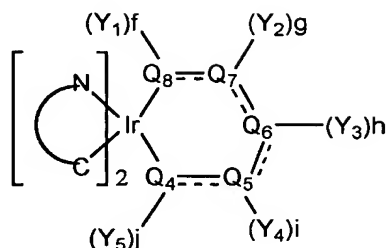
X<sub>1</sub>, X<sub>2</sub>, X<sub>3</sub>은 서로에 관계없이 수소, 치환 또는 비치환된 C1-C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 -C20의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C6-C30의 축합고리기, 치환 또는 비치환된 C6-30의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C2-30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C2-30의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-30의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C20의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C20의 헤테로사이클로알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

c, d 및 e는 서로에 관계없이 0, 1 또는 2이고,

또는 상기 X<sub>1</sub>과 X<sub>2</sub>는 서로 연결되며,

< 화학식 1b >





상기식중 , Q<sub>4</sub>, Q<sub>5</sub>, Q<sub>6</sub>, Q<sub>7</sub>, Q<sub>8</sub> 및 Q<sub>9</sub>은 서로에 관계없이 탄소(C), 산소(O), 질소(N) 또는 황(S)이고,

Y<sub>1</sub>, Y<sub>2</sub>, Y<sub>3</sub>, Y<sub>4</sub>, Y<sub>5</sub>는 서로에 관계없이 단순히 화학결합을 나타내거나 수소, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>30</sub>의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>의 축합고리기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub>-C<sub>30</sub>의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>30</sub>의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>20</sub>의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>의 헤테로사이클로알킬기이고,

f, g, h, i 및 j는 서로에 관계없이 0, 1 또는 2이고,

또는 상기 Y<sub>1</sub>-Y<sub>5</sub>중 선택된 2개가 서로 연결된다.

### 【청구항 3】

제1항에 있어서, 상기 X가,

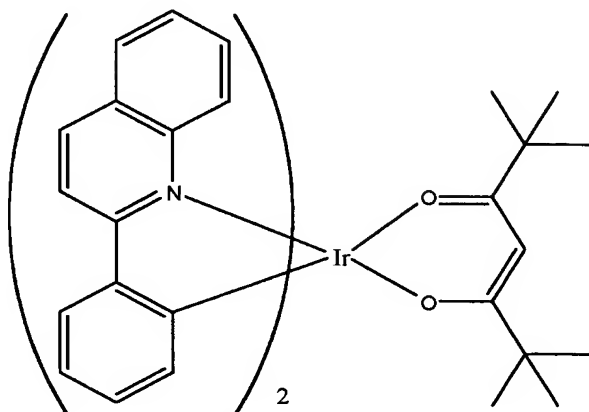
아세틸아세토네이트, 헥사플루오로아세틸아세토네이트, 살리실리덴, 피콜리네이트, 8-하이드록시퀴놀리네이트, α-아미노산 L-프롤린, 벤조일아세토네이트, 디벤조일메탄,

테트라메틸헵탄디온, 1-(2-하이드록시페닐)피라졸레이트로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물.

【청구항 4】

제1항에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물이 화학식 2로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물.

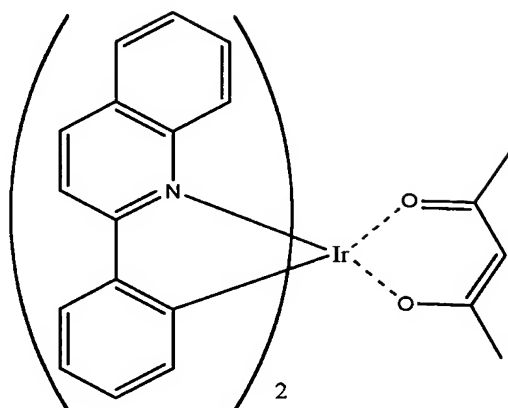
<화학식 2>



【청구항 5】

제1항에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물이 화학식 3으로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물.

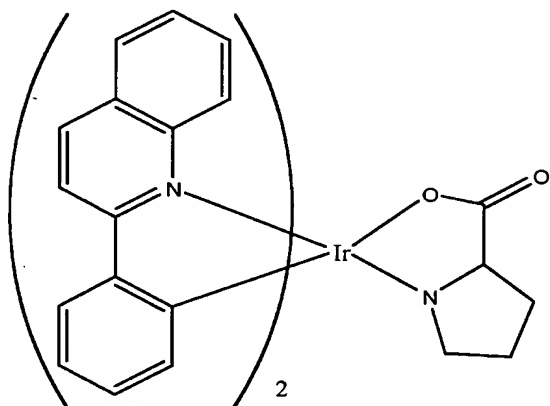
<화학식 3>



## 【청구항 6】

제1항에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물이 화학식 4로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물.

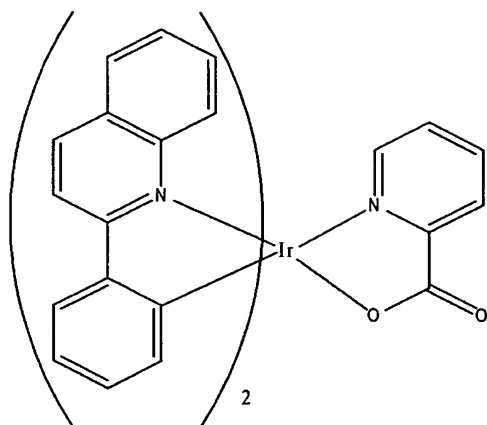
## &lt;화학식 4&gt;



## 【청구항 7】

제1항에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물이 화학식 5로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물.

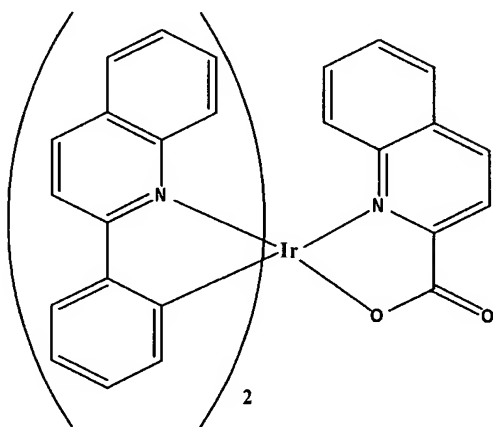
## &lt;화학식 5&gt;



## 【청구항 8】

제1항에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물이 화학식 6으로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물.

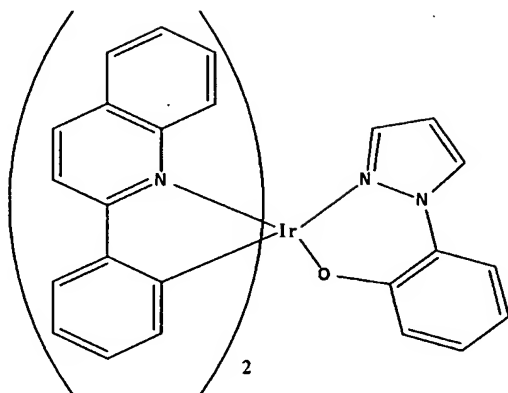
<화학식 6>



## 【청구항 9】

제1항에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물이 화학식 7로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물.

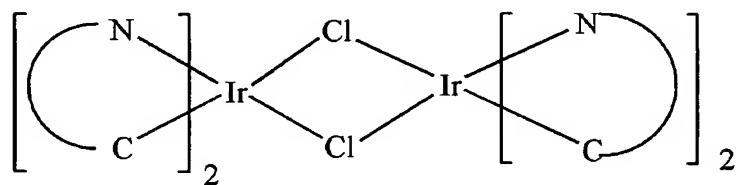
<화학식 7>



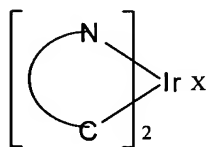
## 【청구항 10】

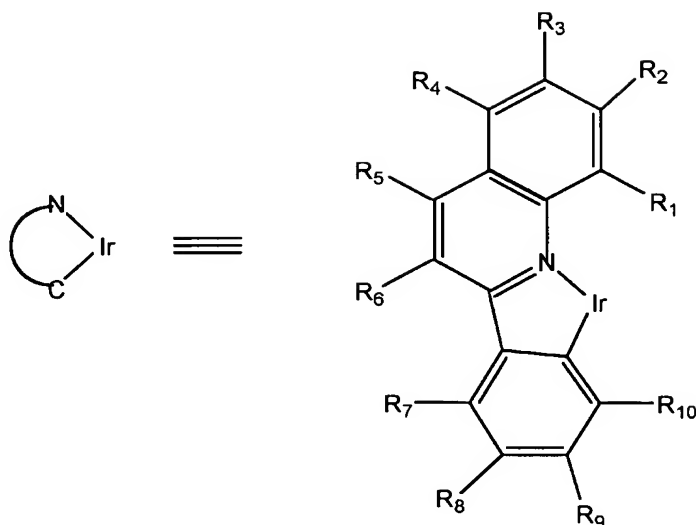
화학식 11로 표시되는 화합물과, X 리간드 함유 화합물(XH)을 반응하는 단계를 포함하는 것을 특징으로 하는 화학식 1로 표시되는 화합물의 제조방법.

## &lt; 화학식 11 &gt;



## &lt; 화학식 1 &gt;





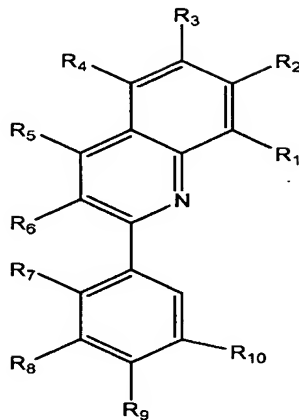
상기식중, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>3</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>8</sub>, R<sub>9</sub> 및 R<sub>10</sub>은 서로에 관계없이 치환 또는 비치환된 C1-C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 -C20의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C6-C30의 축합고리기, 치환 또는 비치환된 C6-30의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C2-30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C2-30의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-30의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C20의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C20의 헤테로사이클로알킬기로 이루어진 군으로부터 선택되며, X는 두자리 리간드(bidentate ligand)이다.

#### 【청구항 11】

제10항에 있어서, 상기 화학식 11로 표시되는 화합물은,

화학식 12로 표시되는  $\omega$ -페닐퀴놀린 화합물과, 이리듐 클로라이드를 반응하여 제조되는 것을 특징으로 하는 화학식 1로 표시되는 화합물의 제조방법.

<화학식 12>



상기식중, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>3</sub>, R<sub>4</sub>, R<sub>5</sub>, R<sub>6</sub>, R<sub>7</sub>, R<sub>8</sub>, R<sub>9</sub> 및 R<sub>10</sub>은 상술한 바와 같다.

#### 【청구항 12】

한 쌍의 전극 사이에 유기막을 구비하고 있는 유기 전계 발광 소자에 있어서,

상기 유기막이 제1항 내지 제9항중 어느 한 항의 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

#### 【청구항 13】

제12항에 있어서, 상기 유기막이 발광층인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

#### 【청구항 14】

제1항 내지 제9항중 어느 한 항의 화학식 1로 표시되는 화합물을 채용하는 것을 특징으로 하는 화상 표시 장치.

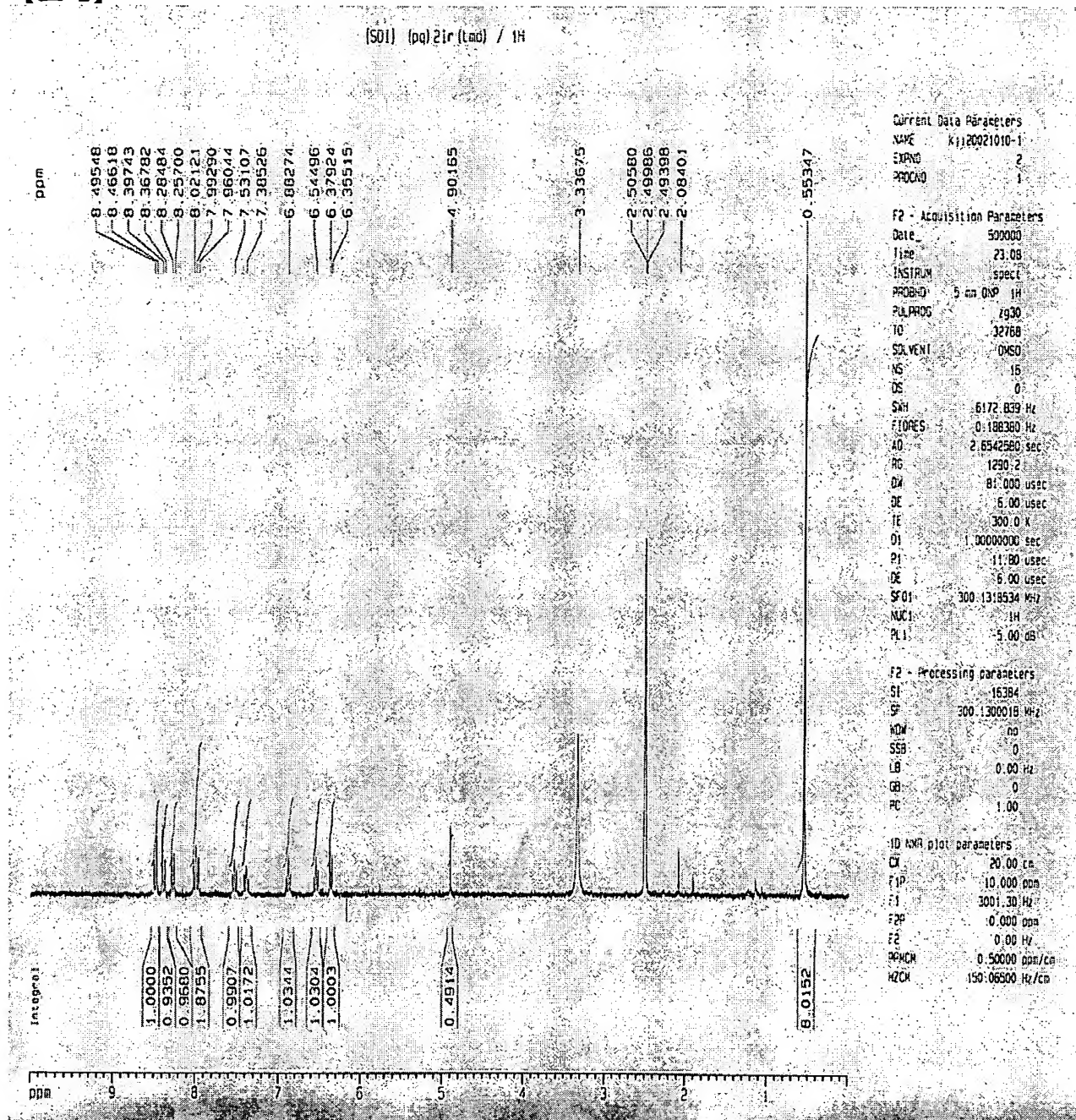
## 【도면】

【도 1】

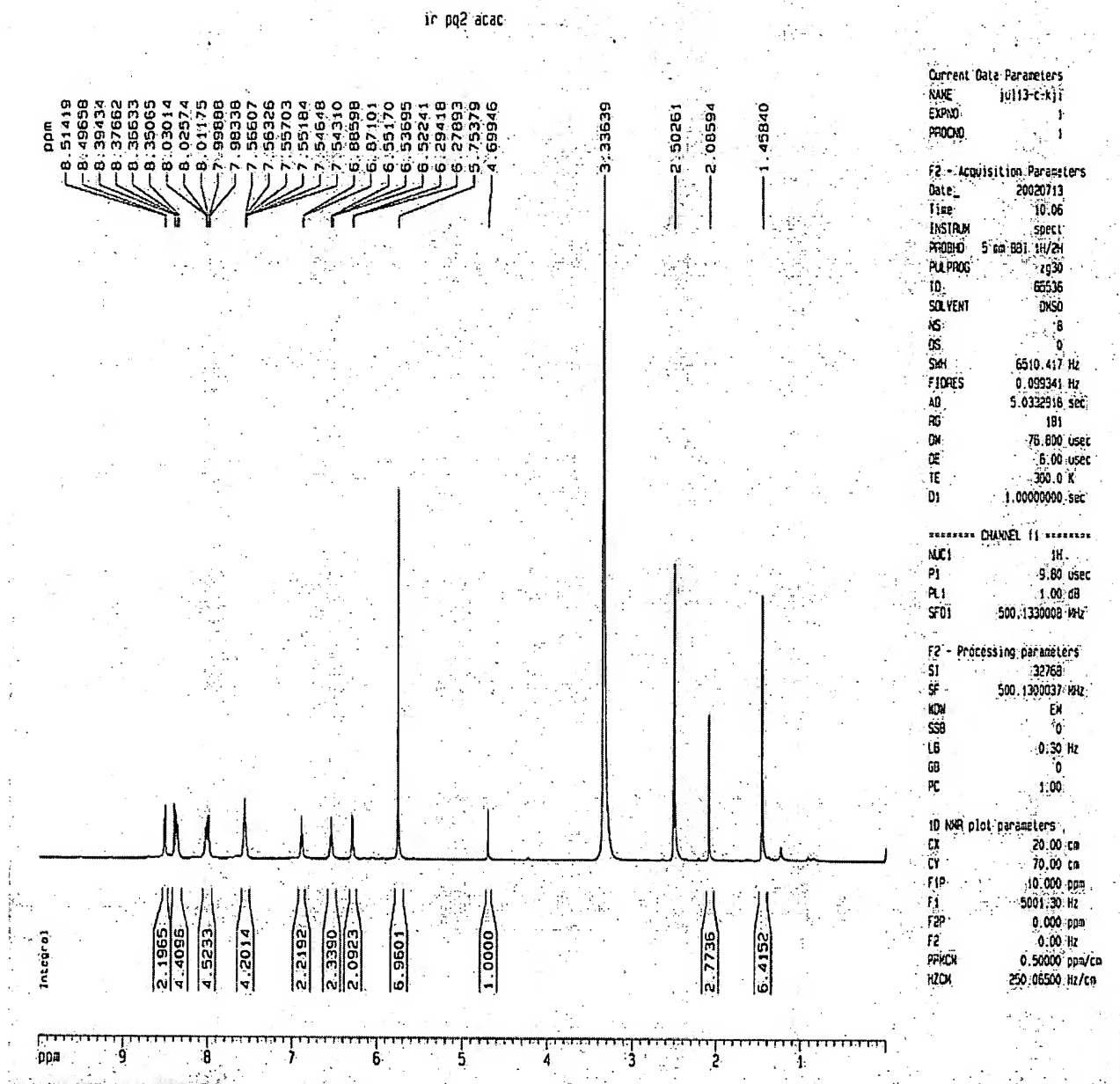
제2전극
전자주입층(EIL)
전자수송층(ETL)
홀억제층(HBL)
발광층(EML)
홀수송층(HTL)
홀주입층(HIL)
제1전극
기판



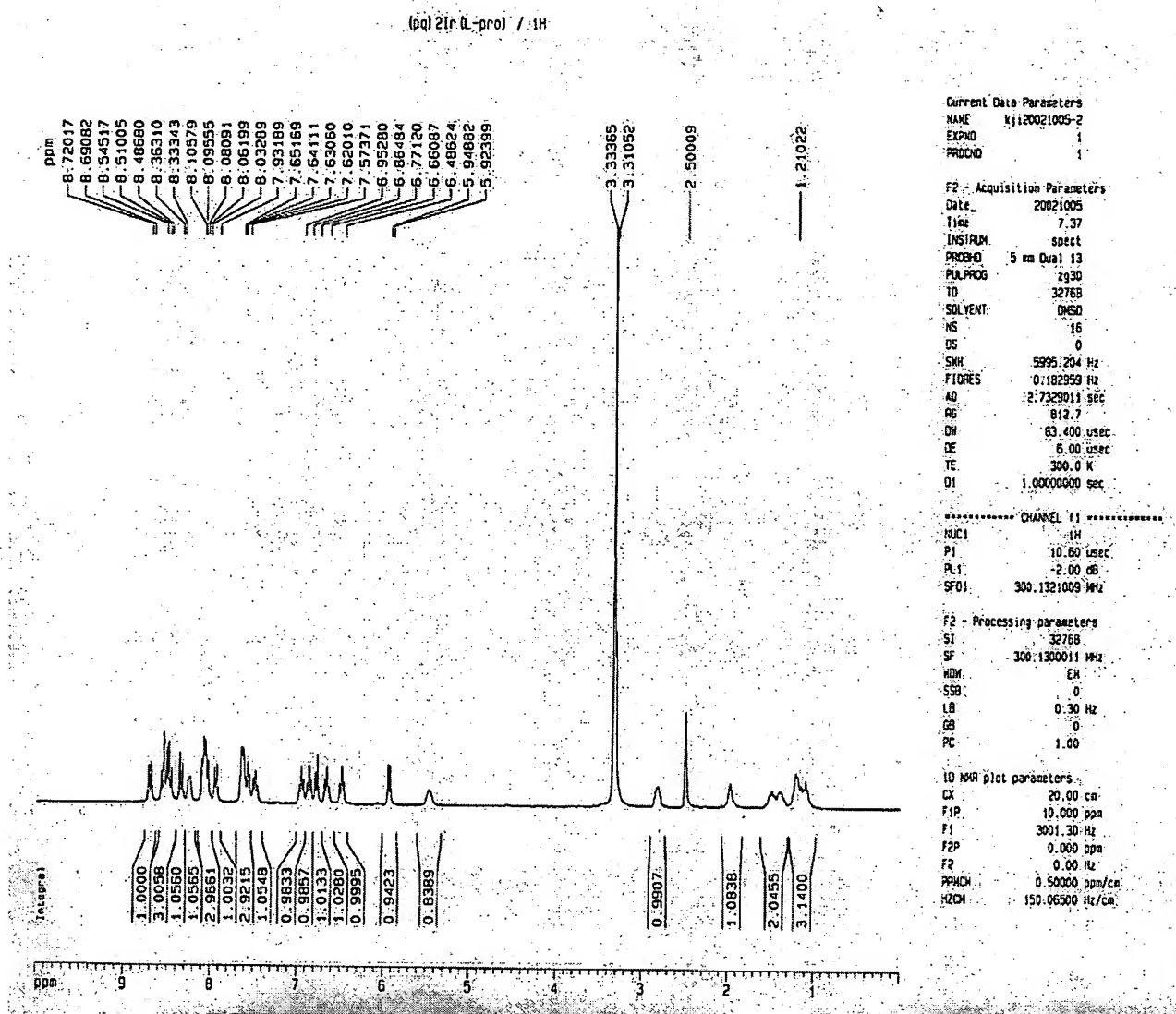
【도 2】



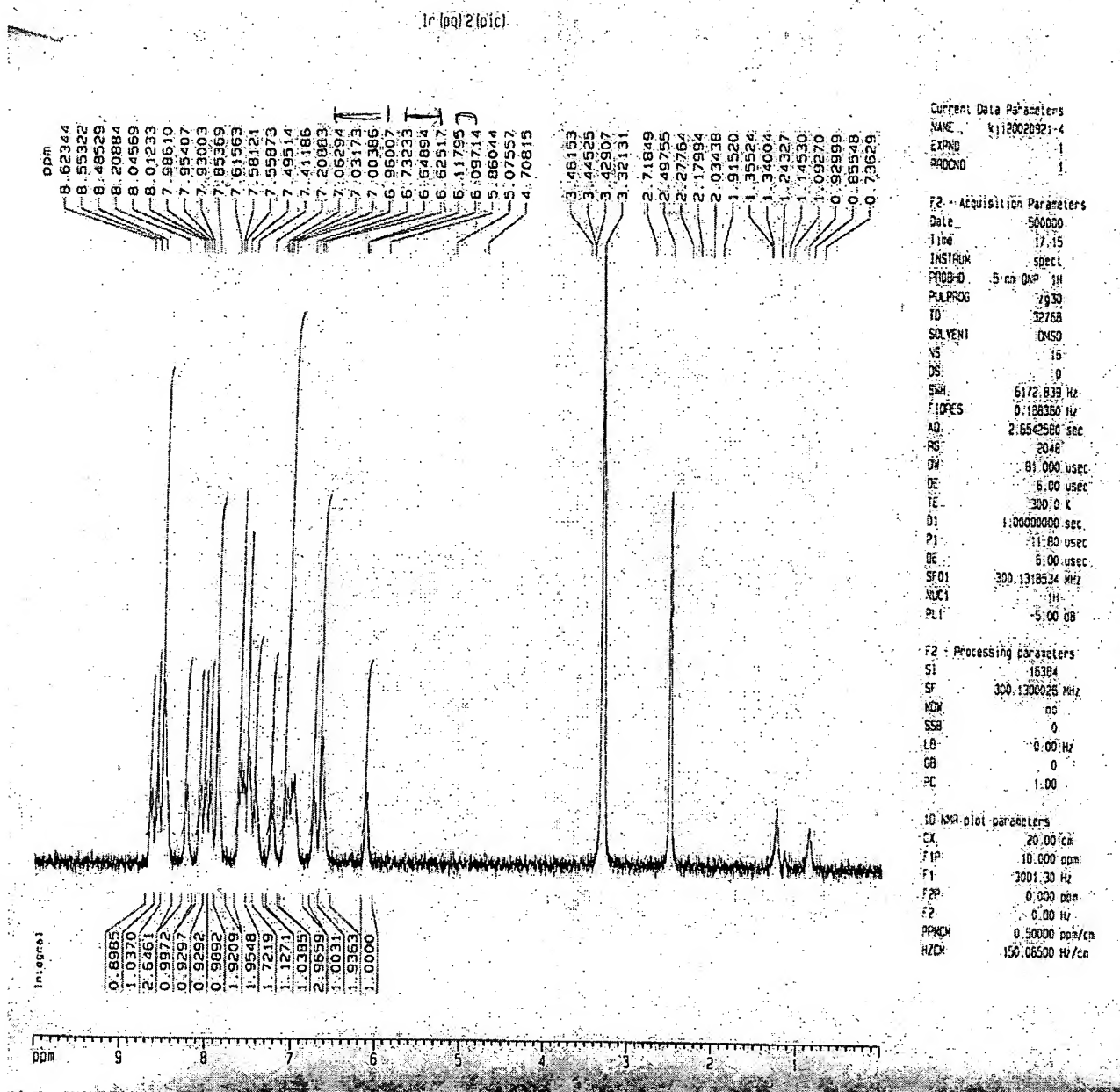
## 【도 3】



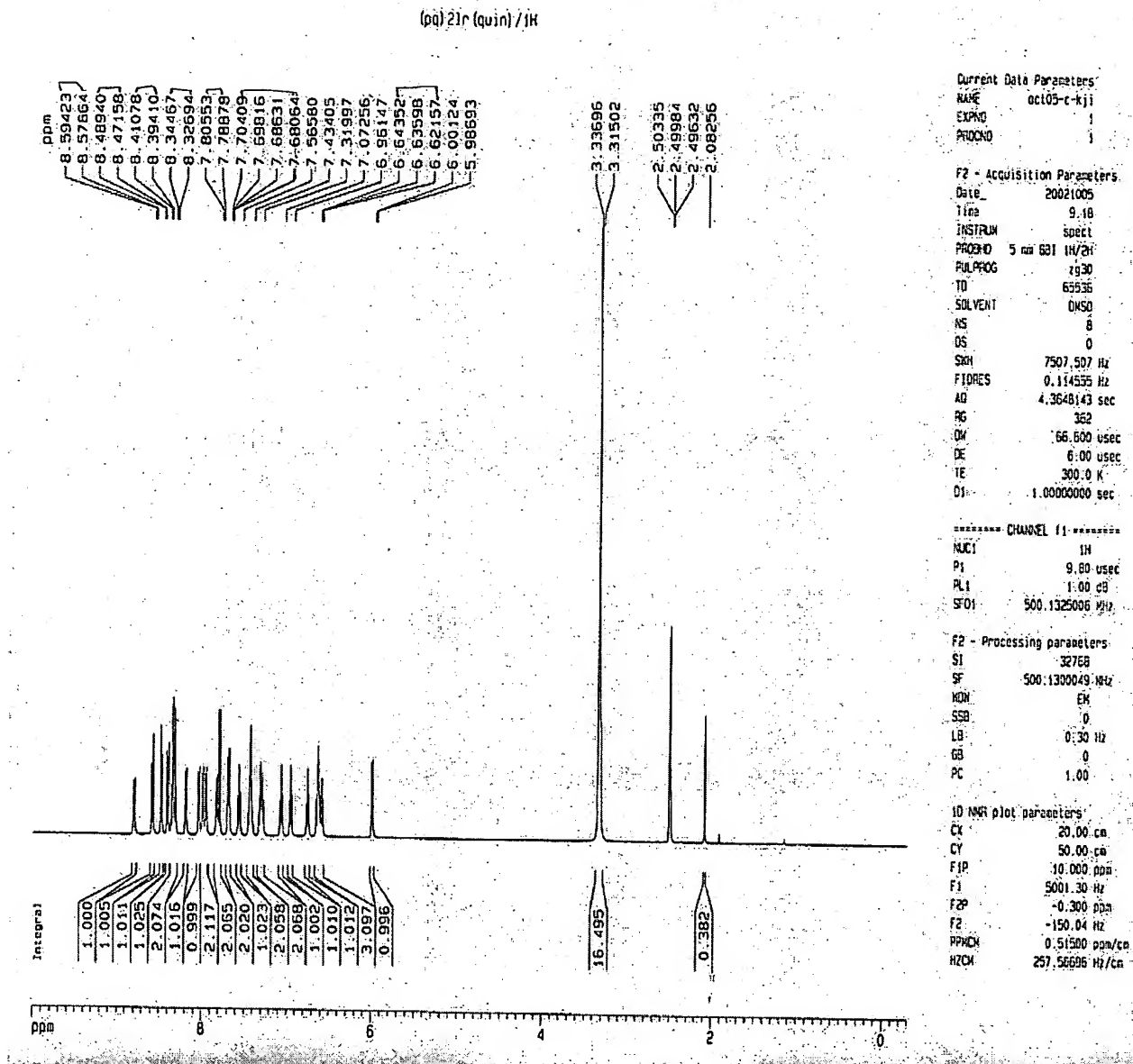
【도 4】



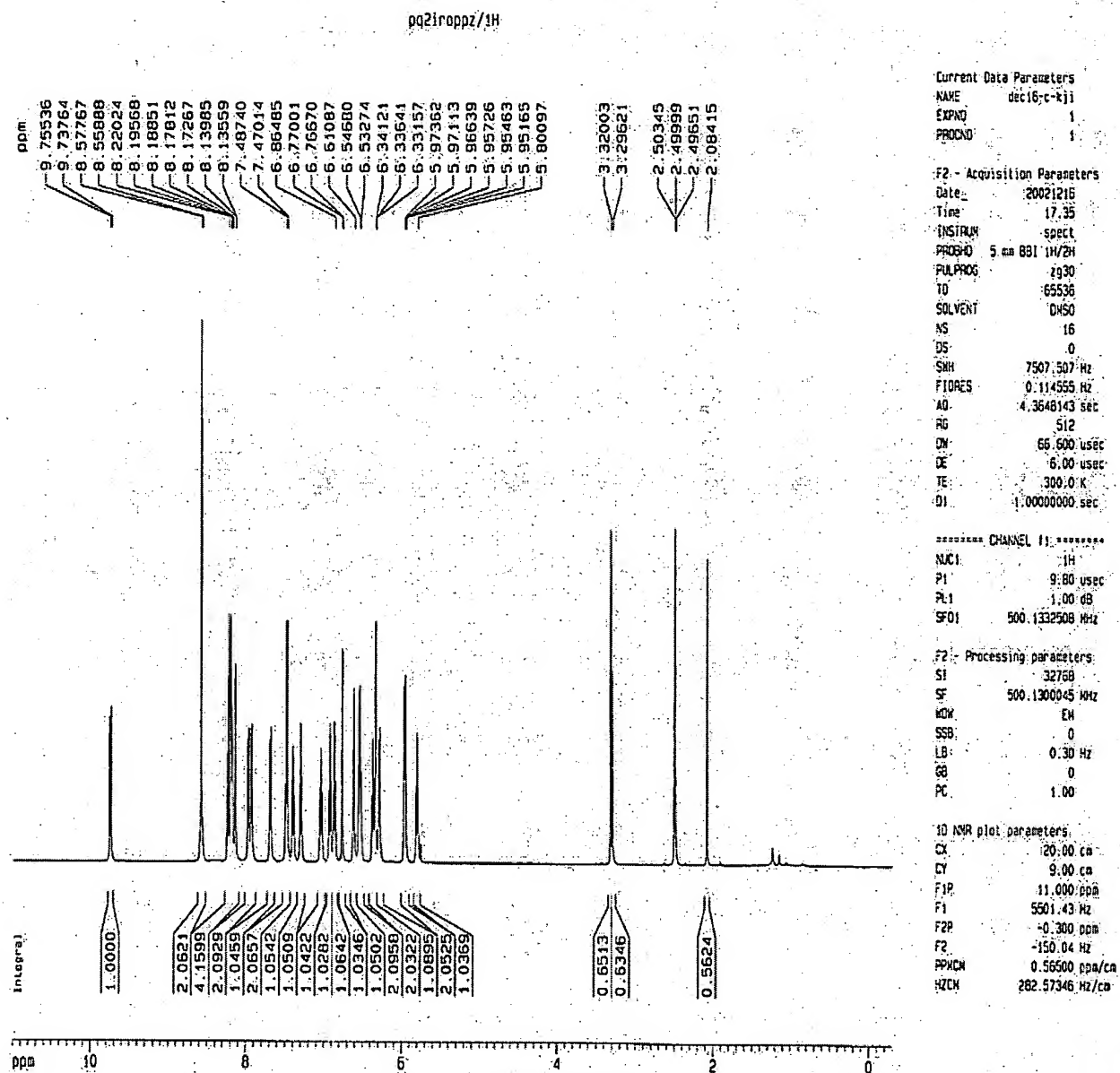
【도 5】



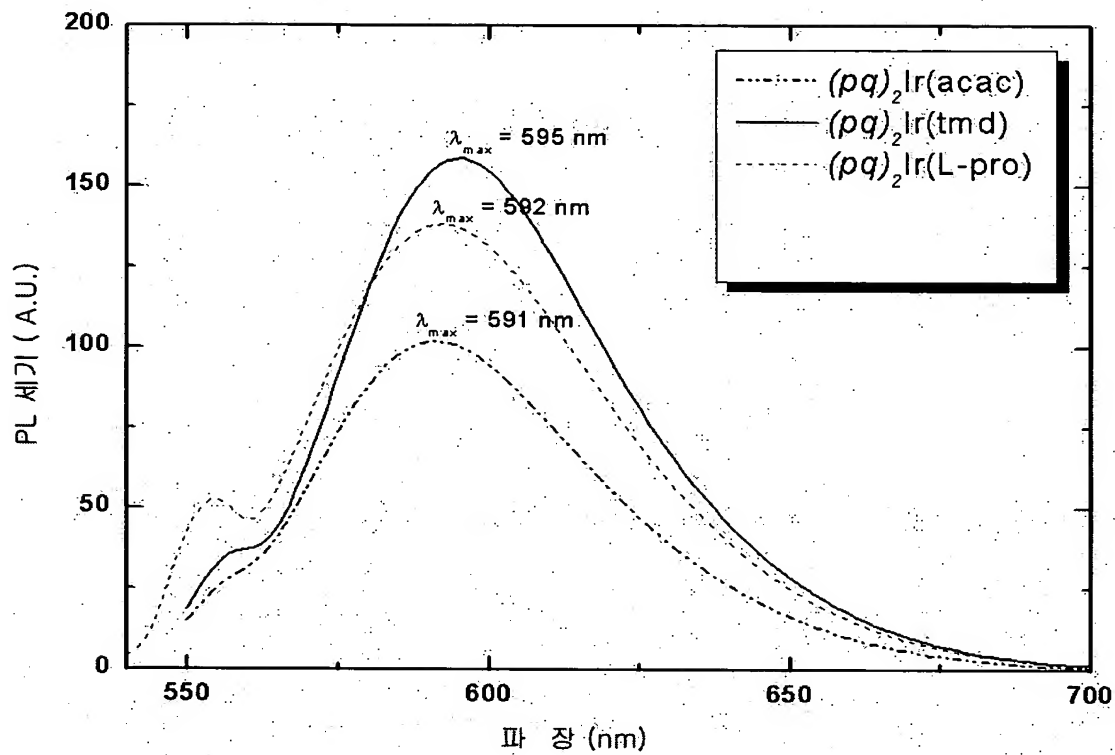
【도 6】



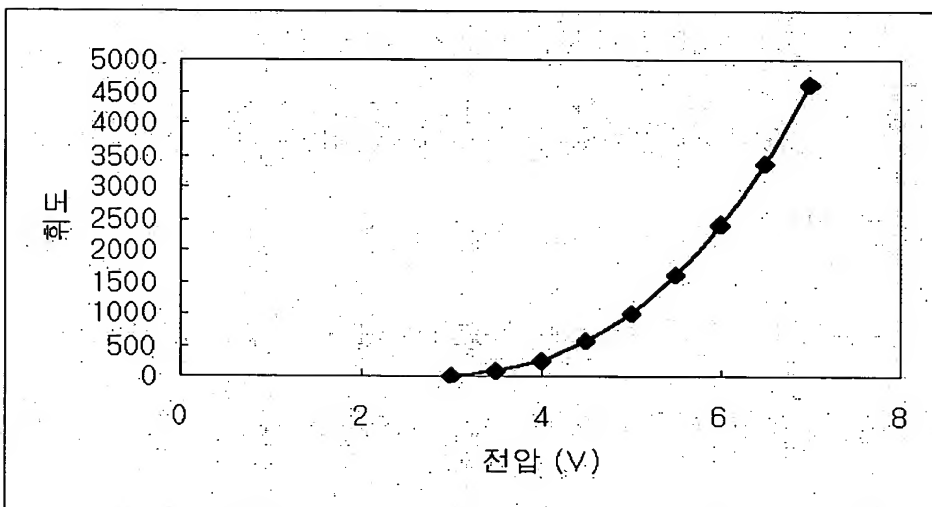
【도 7】



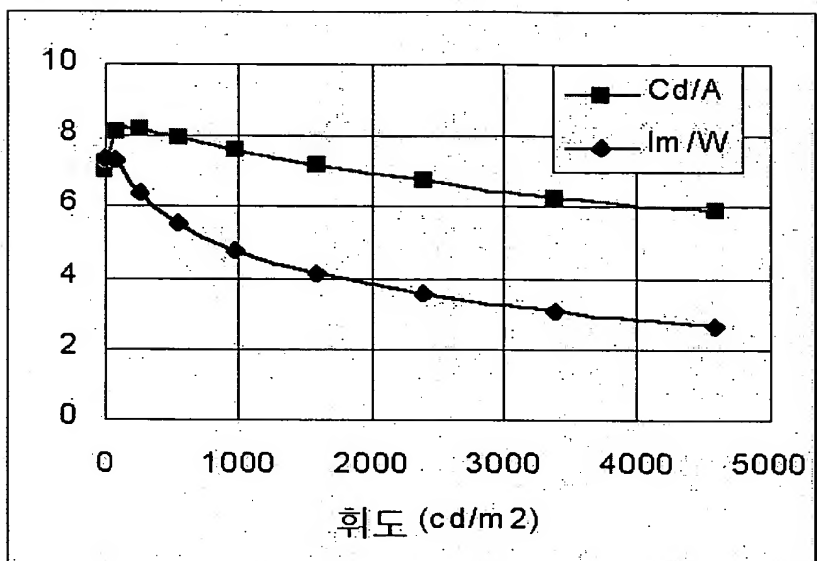
【도 8】



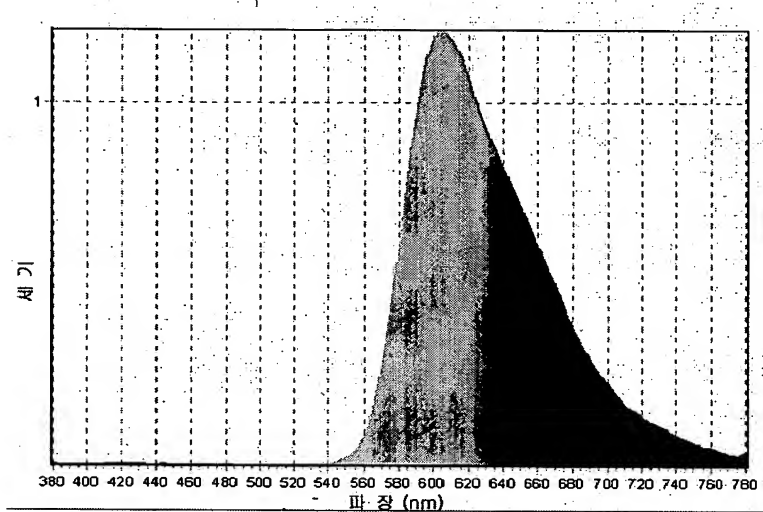
【도 9】



【도 10】

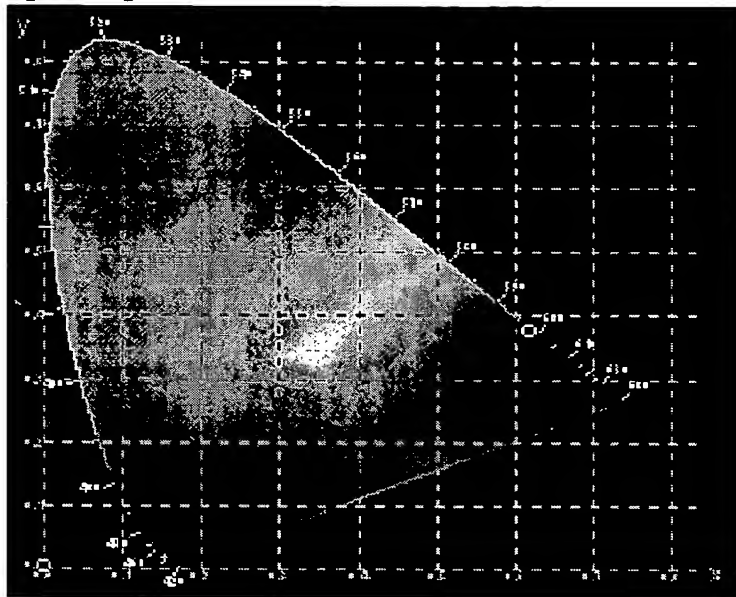


【도 11】





【도 12】



【도 13】

## 빨강 인광재료

Dye	$\lambda_{\max}/\text{nm}$	$\Phi_{\text{phos}}$
<i>pq</i> <sub>2</sub> Ir(acac)	590	0.10
<i>pq</i> <sub>2</sub> Ir(tmd)	593	0.10
<i>pq</i> <sub>2</sub> Ir(L-pro)	590	0.15
<i>pq</i> <sub>2</sub> Ir(pic)	571	0.27
<i>pq</i> <sub>2</sub> Ir(quin)	571	0.28
<i>pq</i> <sub>2</sub> Ir(oppz)	590	0.17

BEST AVAILABLE COPY